5. Hamilton-Formalismus

Der Hamiltonformalismus ist bei der Lösung von konkreten Problemen in der Mechanik gegenüber den Lagrangeschen Methoden nicht unbedingt von Vorteil. Allerdings ist er Ausgangspunkt der kanonischen Quantisierung in der Quantenmechanik und er führt zum in der statistischen Physik wichtigen Begriff des Phasenraumvolumens.

5.1 Legendre-Transformation

Sei f eine konvexe Funktion. Wir ordnen dieser eine neue Funktion zu:

$$f(x) \longmapsto g(u) \quad \text{mit} \quad u(x) = \frac{\partial f}{\partial x}(x) \quad \text{oder} \quad d f(x) = u(x)\,dx$$

$$\text{und} \quad x(u) = \pm \frac{\partial g}{\partial u} \quad \text{oder} \quad d g(u) = \mp x(u)\,du$$

Es folgt dann, daß g die folgende Form hat:

$$g(u) = \pm \big[\underbrace{u\, x(u)}_{x \text{ und die Steigung von } f} - f(x(u))\big]$$

NB: $\frac{\partial g}{\partial x} = 0$ by constructi
↳ nur partiell ...

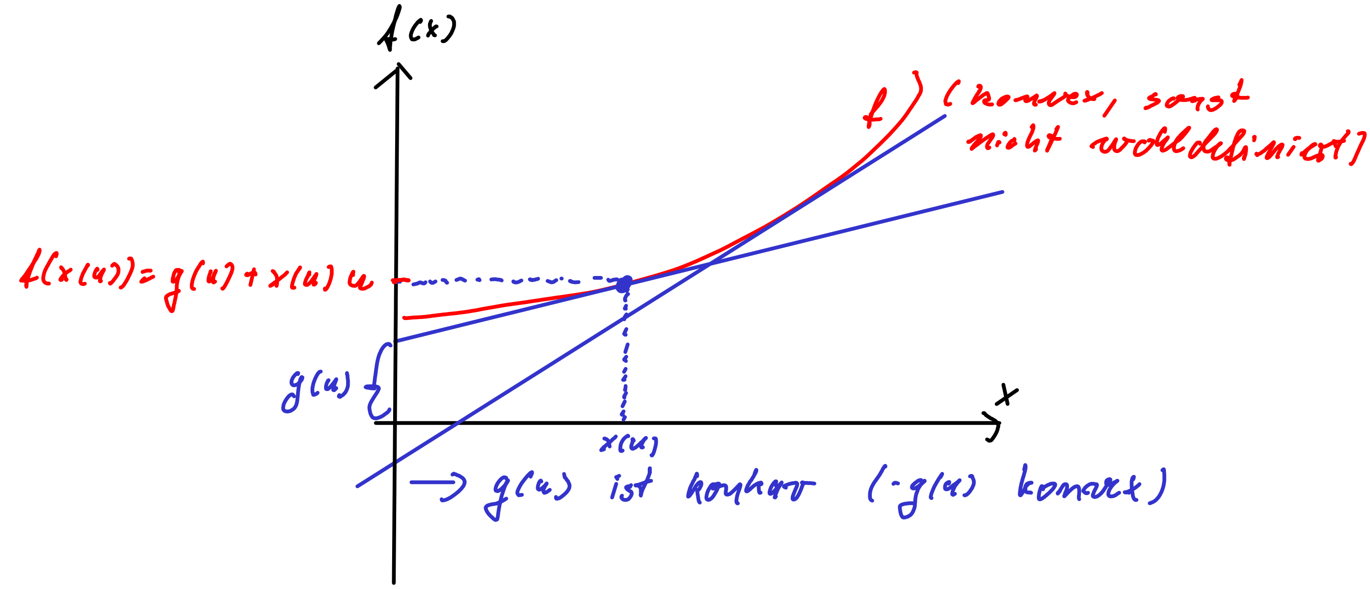
Dies läßt sich direkt nachweisen

$$\pm \frac{\partial g}{\partial u} = x(u) + u \frac{\partial x}{\partial u} - \underbrace{\frac{\partial f}{\partial x}}_{=u} \frac{\partial x}{\partial u} = x(u)$$

↳ mit x als Funktion von u

Geometrische Interpretation:

Der Steigung u wird der Schnittpunkt $g(u)$ mit der f-Achse zugeordnet



$\longrightarrow$ $g(u)$ ist konkav ($-g(u)$ konvex)

Inverse Transformation: Wir gehen aus von

$$x = \pm \frac{\partial g}{\partial u}, \qquad f(x) = x\,u(x) \mp g(u(x))$$

Herleitung:

$$u = \frac{\partial f}{\partial x}$$

Verlangt wird: $df = \frac{\partial f}{\partial x}\,dx = u\,dx$ und $dg = \pm x\,du$

$$d(\pm u x) = \pm(x\,du + u\,dx) = dg \pm df$$

$$\longrightarrow dg = d(\mp f \pm u x) \longrightarrow g(u) = \pm\left(-f(x(u)) + u\,x(u)\right)$$

<u>Extremaleigenschaft</u> (oberes Vorzeichen)

$$g(u) = \max_x \left(ux - f(x)\right) \Longleftrightarrow \frac{\partial}{\partial x}\left(ux - f(x)\right) = 0 \Longleftrightarrow u = \frac{\partial f}{\partial x}$$

$$f(x) = \max_u \left(xu - g(u)\right) \Longleftrightarrow \frac{\partial}{\partial u}\left(xu - g(u)\right) = 0 \Longleftrightarrow x = \frac{\partial g}{\partial u}$$

Zwischen konvexen (oder konkaven, je nach Vorzeichen) lassen sich invertierbar Legendretransformationen durchführen. Zu Differentialgleichungen im einem Satz von Variablen lassen daher äquivalente Gleichungen im anderen Satz finden.

5.2 Hamiltonfunktion

Verallgemeinerte oder kanonische Impulse

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (i = 1, 2, \ldots, f)$$

Eliminiere die verallgemeinerten Geschwindigkeiten $\dot{q}_i$ zugunsten der kanonischen Impulse p_i:

$$p_i = \frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}_i} \Longrightarrow \dot{q}_k = \dot{q}_k(q, p, t)$$

mit $q = (q_1, \ldots, q_f)$ etc.

$\longrightarrow$ Definiere die

$$\boxed{\begin{array}{l}\underline{\text{Hamiltonfunktion}} \\ H(q,p,t) = \sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i(q,p,t)\, p_i - L(q, \dot{q}(q,p,t), t)\end{array}}$$

$H = \sum \dot{p}_i q_i - L$ ist also eine Funktion der Argumente $q_1, \ldots, q_f, p_1, \ldots, p_f, t$.

Die Hamiltonfunktion H und die Lagrangefunktion L stehen durch eine Legendretransformation in Zusammenhang.

Um die Geschwindigkeiten in der Form $\dot{q}_i = \dot{q}_i(q,p,t)$ zu erhalten, berechnen wir das totale Differential.

$$dH = \sum_{i=1}^{f} \Big(\dot{q}_i\, dp_i + \cancel{p_i\, d\dot{q}_i} - \underbrace{\frac{\partial L}{\partial q_i}}_{= \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{d}{dt} p_i \text{ (Euler-Lagrange)}} dq_i - \cancel{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i} \Big) - \frac{\partial L}{\partial t} dt$$

$$= \sum_{i=1}^{f} (\dot{q}_i\, dp_i - \dot{p}_i\, dq_i) - \frac{\partial L}{\partial t} dt$$

$$\stackrel{!}{=} \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i \right) + \frac{\partial H}{\partial t} dt$$

$\Longrightarrow$ **Kanonische Gleichungen (oder Hamiltonsche Gleichungen)**

$$\boxed{\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} , \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}}$$

Außerdem ist $\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}$.

Als ein System von $2f$ Differentialgleichungen 1. Ordnung sind die kanonischen Gleichungen äquivalent zu den f Lagrangegleichungen 2. Ordnung.

Hamiltonfunktion und Energie

Für skleronome, holonome Zwangsbedingungen, ruhende Koordinaten und konservative Kräfte gilt:

$$\sum_{r=1}^{f} \dot{q}_r \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} = \sum_{r=1}^{f} \dot{q}_r \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_r} = 2T$$

Um dies zu zeigen, schreiben wir

$\vec{r}_i = \vec{r}_i (q_1, \dots, q_f)$

Dabei tritt kein explizite Abhängigkeit von t oder $\dot{q}_i$ auf, da die Zwangsbedingungen holonom und skleronom sind.

$$\longrightarrow \dot{\vec{r}}_i = \sum_{k=1}^{f} \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_k} \dot{q}_k$$

$$\longrightarrow T = \sum_{i=1}^{N} \frac{m_i}{2} \dot{\vec{r}}_i^{\,2} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{k,l=1}^{f} \frac{m_i}{2} \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_k} \cdot \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_l} \dot{q}_k \dot{q}_l$$

ruhende Koordinaten

$$= \sum_{k,l=1}^{f} \underbrace{\sum_{i=1}^{N} \frac{m_i}{2} \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_k} \cdot \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_l}}_{=: a_{kl}} \dot{q}_k \dot{q}_l = \sum_{k,l=1}^{f} a_{kl} \dot{q}_k \dot{q}_l$$

$\longrightarrow$

$$\sum_{r=1}^{f} \dot{q}_r \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} = \sum_{r=1}^{f} \dot{q}_r \left(\sum_{l=1}^{f} a_{rl} \dot{q}_l + \sum_{k=1}^{f} a_{kr} \dot{q}_k \right) = 2 \sum_{k,l=1} a_{kl} \dot{q}_k \dot{q}_l = 2T$$

$\longrightarrow$

$$H(q,p,t) = \sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i(q,p,t) p_i - L(q, \dot{q}(q,p,t), t) = \sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - T + U$$

$$= 2T - T + U = T + U = E$$

Erhaltungsgrößen

Betrachte

$$\frac{dH}{dt} = \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i - L \right) \underset{\uparrow}{=} - \frac{\partial L}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}$$

Kapitel 2.3 – „Energieerhaltung"

Aus $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$ folgt also die Erhaltungsgröße $H = \text{const.}$

Wenn, wie oben diskutiert, H mit der Energie identifiziert werden kann, folgt also Energieerhaltung.

Die Erhaltung des generalisierten Impulses für zyklische Koordinaten folgt unmittelbar aus den kanonischen Gleichungen:

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \Longrightarrow \frac{\partial H}{\partial q_i} = 0 = -\dot{p}_i \Longrightarrow p_i = \text{const.}$$

Beispiel Teilchen im Potential

$$L = \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}^{\,2} - U(\vec{r}) \longrightarrow$$

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = m \dot{q}_i$$

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = m \dot{\vec{r}} \cdot \dot{\vec{r}} - L = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + U(\vec{r})$$

Kanonische Gleichungen: $\dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}} = -\vec{\nabla} U \longrightarrow$ Newtonsche Bewegungsgleichung

$$\dot{\vec{r}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} = \frac{\vec{p}}{m}$$

5.3 Phasenraum

Die $\{p, q\} \equiv \{p_1, \dots, p_f, q_1, \dots, q_f\}$ bilden einen $2f$-dimensionalen kartesischen Raum, den Phasenraum Γ.

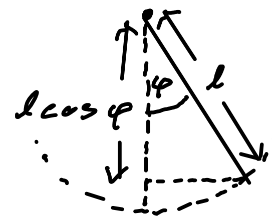
Raum der $\{q\}$: Konfigurationsraum
Raum der $\{p\}$: Impulsraum

Folgende Sachverhalte können wir uns unmittelbar überlegen:

* Der Bahn eines Teilchens im Konfigurationsraum kann eine Phasenbahn im Phasenraum zugeordnet werden.
* Bei bekannter Hamiltonfunktion folgt aus den Koordinaten eines Punktes im Phasenraum (entspricht $2f$ Randbedingungen) eindeutig eine Phasenbahn $\{p(t), q(t)\}$.
* Zu jedem Punkt im Phasenraum gehört (wegen der Eindeutigkeit) genau eine Phasenbahn $\longrightarrow$
  Zwei verschiedene Phasenbahnen können sich nicht schneiden.
* Bei konservativen Systemen sind die Phasenbahnen wegen der Bedingung $H(q, p) = E = \text{const.}$ an eine $(2f-1)$-dimensionale Hyperfläche gebunden.

Beispiel Phasendiagramm des ebenen Pendels

Länge l



$$L = \frac{1}{2} m l^2 \dot{\varphi}^2 - m g l (1-\cos\varphi)$$

Kanonischer Impuls: $p_\varphi = m l^2 \dot{\varphi}$

$$H(\varphi, p_\varphi) = p_\varphi \dot{\varphi} - \frac{1}{2} m l^2 \dot{\varphi}^2 + m g l (1-\cos\varphi)$$

$$= \frac{p_\varphi^2}{2ml^2} + m g l (1-\cos\varphi)$$

Wir betrachten folgende Fälle:

(a) Sei $\varphi_0 < \pi$ der Maximalausschlag $\longrightarrow$

Energieerhaltung:

$$\frac{1}{2} m l^2 \dot{\varphi}^2 + m g l (1-\cos\varphi) = m g l (1-\cos\varphi_0) = E$$

$$\Longrightarrow p_\varphi = \pm \sqrt{2 m^2 l^3 g \left[(1-\cos\varphi_0) - (1-\cos\varphi)\right]}$$

$$= \pm m l \sqrt{2gl} \sqrt{\cos\varphi - \cos\varphi_0}$$

(b) Anfangsbedingung:

$$\varphi(0) = 0$$

$$\dot{\varphi}(0) = 2\sqrt{\frac{g}{l}} \qquad H(0) = \frac{1}{2} m l^2 \, 4 \, \frac{g}{l} = 2mgl = mgl(1-\cos\pi)$$

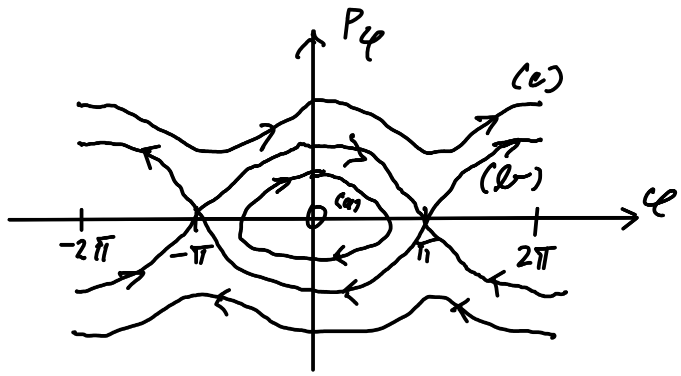
$\longrightarrow$ Das Pendel erreicht nach unendlich langer Zeit den Punkt $\varphi = \pi$ und bleibt dort in Ruhe.

Mit $1+\cos\varphi = 2\cos^2\frac{\varphi}{2}$

$$\Longrightarrow p_\varphi = \pm m l \sqrt{2gl} \sqrt{\cos\varphi + 1} = \pm m l \sqrt{2gl} \cos\frac{\varphi}{2}$$

(c) Sich überschlagendes Pendel

$$p_\varphi = \pm m\, l \sqrt{2gl}\, \sqrt{\cos\varphi - 1 + \frac{E}{mgl}}$$



Die Bahnen schneiden sich nicht. (Beachte, daß im Fall (b) die Bahnen jeweils für $\varphi = 2\pi n - 1$ mit $n \in \mathbb{Z}$ enden.)

Äquivalenz von Hamiltonschen Gleichungen und Hamiltonschen Prinzip

Betrachte die Wirkung

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt\; L(q, \dot{q}, p, t) = \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i p_i - H(p, q, t) \right\}$$

An Stelle der Variation δq im Konfigurationsraum mit $\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$ betrachten wir jetzt Variationen im Phasenraum δq, δp mit $\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = \delta p(t_1) = \delta p(t_2) = 0$.

$\longrightarrow$

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{i=1}^{f} \left\{ \dot{q}_i \delta p_i + p_i \delta \dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i \right\} = 0$$

Partielle Integration $\longrightarrow$

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{i=1}^{f} \left\{ \left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) \delta p_i - \left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \delta q_i \right\} = 0$$

Da δp und δq beliebig sind, verschwinden die runden Klammern, und es ergeben sich die Hamiltonschen Gleichungen.

5.4 Poisson-Klammern

Wir nennen eine differenzierbare Funktion $f(p,q,t)$ eine Observable. Mit

$$\frac{df}{dt} = \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \frac{\partial f}{\partial t} \implies$$

$$\frac{df}{dt} = \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial f}{\partial t}$$

Definieren wir für zwei Observablen f, g die

Poissonklammer

$$\boxed{\{f,g\} = \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \right)}$$

Wenn nötig, kann man auch $\{f,g\}_{q,p}$ schreiben, um die generalisierten Koordinaten q und kanonischen Impulse p zu spezifizieren.

dann können wir schreiben:

$$\boxed{\frac{df}{dt} = \{f,H\} + \frac{\partial f}{\partial t}}$$

Mit $\frac{\partial f}{\partial q_i} = -\{p_i, f\}$ und $\frac{\partial f}{\partial p_i} = \{q_i, f\}$ lassen sich die kanonischen Gleichungen schreiben als:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \{q_i, H\} \quad \text{und} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = \{p_i, H\}$$

Fundamentale Poisson-Klammern

$$\{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0 \quad , \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$$

Produktregel

$$\{fg, h\} = \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} g + \frac{\partial g}{\partial q_i} f\right) \frac{\partial h}{\partial p_i} - \left(\frac{\partial f}{\partial p_i} g + \frac{\partial g}{\partial p_i} f\right) \frac{\partial h}{\partial q_i}$$

$$= \{f, h\} g + f \{g, h\}$$

Mit einiger Rechnung folgt die

Jacobi-Identität

$$\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0$$

Beispiel Harmonischer Oszillator

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{k}{2} x^2 \longrightarrow p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$$

$$\Longrightarrow H(x,p) = \dot{x} p - L = \frac{p^2}{m} - L = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} k x^2$$

$$\left.\begin{aligned} \dot{x} &= \{x, H\} = \frac{1}{2m}\{x, p^2\} = \frac{p}{m} \\ \dot{p} &= \{p, H\} = \frac{k}{2}\{p, x^2\} = -kx \end{aligned}\right\} \Longrightarrow m\ddot{x} = \dot{p} = -kx$$

Newtonsche Bewegungsgleichung

Die Poissonklammern werden in der kanonischen Quantisierung in Gleichungen für Operatoren (im Heisenberg-Bild) überführt.

5.5 Kanonische Transformationen

Im Fall einer zyklischen Koordinate ist der zugehörige kanonische Impuls erhalten:

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = 0$$

Ob zyklische Koordinaten in H enthalten sind, hängt von der Wahl der Koordinaten ab. Z.B. Bewegung im Zentralpotential in einer Ebene: mit kartesischen Koordinaten (x, y) ist keine zyklisch, mit Polarkoordinaten (ϱ, φ) ist φ zyklisch $\longrightarrow$ Drehimpulserhaltung.

Eine Vereinfachung kann also ggf. erreicht werden, wenn man von einem Satz Koordinaten (p, q) durch eine <u>Phasenraumtransformation</u> zu $(P, Q) = (P(p,q,t), Q(p,q,t))$ mit möglichst vielen zyklischen Koordinaten wechseln kann. Sei $K(P, Q, t)$ die neue Hamiltonfunktion.

Für eine reine <u>Punkttransformation</u> $Q(q,t)$ können wir $L(q(Q,t), \dot{q}(Q,t), t) = L_K(Q, \dot{Q}, t)$ und $K = P_i \dot{Q}_i - L_K$ berechnen. Dann gelten die kanonischen Gleichungen

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} \quad \text{und} \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i}$$

Dies ist für Transformationen, die keine reinen Koordinatentransformationen sind, nicht allgemein der Fall. Eine Transformation heißt <u>kanonisch im weiteren Sinn</u>, wenn es für alle $H(p, q, t)$ ein $K(P, Q, t)$ gibt, welches die kanonischen Gleichungen erfüllt.

Gemäß obiger Diskussion zur Äquivalenz von Hamiltonschem Prinzip und Hamiltonschen Gleichungen läßt sich diese Forderung wie folgt fassen:
Eine Transformation ist kanonisch im weiteren Sinn, wenn für alle Zeiten t_1 und t_2 und alle Hamiltonfunktionen H aus

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i p_i - H(p, q, t) \right\} = 0$$

folgt

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \sum_{i=1}^{f} \dot{Q}_i P_i - K(P, Q, t) \right\} = 0$$

Dies gilt genau dann, wenn sich die beiden Integranden um einen konstanten Faktor und eine totale Zeitableitung unterscheiden:

$$\sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i p_i - H(p, q, t) = c \left[\sum_{i=1}^{f} \dot{Q}_i P_i - K(P, Q, t) \right] + \frac{d}{dt} F(q, p, Q, P, t)$$

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt \; \frac{d}{dt} F(q, p, Q, P, t) = \delta \left[F\big|_{t_2} - F\big|_{t_2} \right] = 0$$

Ist $c = 1$, dann spricht man von einer <u>kanonischen Transformation im engeren Sinn</u> oder einfach nur einer <u>kanonischen Transformation.</u> Ausgehend von beliebigen $c \neq 0$ läßt sich diese Form immer erhalten mit

$$Q_i \longmapsto \hat{Q}_i = c\, Q_i \qquad P_i \longmapsto \hat{P}_i = P_i$$
$$K \longmapsto \hat{K} = c\, K\left(\tfrac{1}{c}\hat{Q}, \hat{P}, t\right)$$

$$\Longrightarrow \quad \frac{\partial \hat{K}(\hat{Q},\hat{P},t)}{\partial \hat{Q}_i} = c\, \frac{\partial K(Q,P,t)}{\partial Q_i}\, \frac{1}{c} = -\dot{P}_i$$

$$\frac{\partial \hat{K}}{\partial \hat{P}_i} = c\, \frac{\partial K}{\partial P_i} = c\, \dot{Q}_i = \dot{\hat{Q}}_i$$

Wir fassen zusammen:

$$\boxed{\begin{array}{l}\underline{\text{Kanonische Transformation}}\\[1em] \left[\sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i p_i - H(p,q,t)\right] - \left[\sum_{i=1}^{f} \dot{Q}_i P_i - K(P,Q,t)\right] = \frac{d}{dt} F(q,p,Q,P,t)\end{array}}$$

Erzeugende kanonischer Transformationen

Wir haben $2f$ Transformationsgleichungen für $4f$ alte & neue Variablen. Neben der Zeit hängt F daher nur von $2f$ unabhängigen Größen ab. Man kategorisiert dabei die folgenden Möglichkeiten:

$$\underbrace{F_1(q,Q,t),\; F_2(q,P,t),\; F_3(p,Q,t),\; F_4(p,P,t)}_{\to \text{ erzeugen bestimmte Transformationen}},\; \underbrace{F_5(q,p,t),\; F_6(Q,P,t)}_{\to \text{ erzeugen Klasse von Transformationen - keine Erzeugende im eigentlichen Sinne}}$$

Betrachte zunächst F_5:

Zur Berechnung des totalen Ableitungsterms bemerken wir:

$$\left[\sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i p_i - H(p,q,t)\right] - \left[\sum_{i=1}^{f} \dot{Q}_i(q,p,t) P_i(q,p,t) - K(Q(q,p,t), P(q,p,t), t)\right]$$

$$= \sum_{i=1}^{f} \left[p_i \dot{q}_i - P_i \sum_{j=1}^{f} \left(\frac{\partial Q_i}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial Q_i}{\partial p_j} \dot{p}_j \right) - P_i \frac{\partial Q_i}{\partial t} \right] - H + K$$

$$= \frac{d}{dt} F_5(p,q,t) = \sum_{j=1}^{f} \left(\frac{\partial F_5}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_5}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \frac{\partial F_5}{\partial t}$$

Da p_i und q_i voneinander unabhängige Funktionen sind, gilt dies auch für $\dot{p}_i$ und $\dot{q}_i$.

Koeffizientenvergleich $\longrightarrow$

$$p_i - \sum_{k=1}^{f} P_k \frac{\partial Q_k}{\partial q_i} = \frac{\partial F_5}{\partial q_i}$$

$$-\sum_{k=1}^{f} P_k \frac{\partial Q_k}{\partial p_i} = \frac{\partial F_5}{\partial p_i}$$

Eine Transformation ist genau dann kanonisch, wenn es ein F_5 gibt, welches diese Gleichungen erfüllt.

$$K = H + \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial Q_i}{\partial t} + \frac{\partial F_5}{\partial t}$$

Dies ist die transformierte Hamiltonfunktion

Die ersten beiden Gleichungen sind dabei partielle Differentialgleichungen für Q_k, so daß sich i.A. ganze Klassen von Lösungen ergeben. Entsprechendes gilt für F_6.

Beispiel

$$Q = p^{-1}, \quad P = q p^2 \quad \longrightarrow \quad \frac{\partial F_5}{\partial q} = p, \quad \frac{\partial F_5}{\partial p} = P \frac{1}{p^2} = q$$

Integration der ersten Gleichung $\longrightarrow$

$$F_5 = \int dq\, p + g(p,t) = pq + g(p,t)$$

Nach der zweiten Gleichung kann g dann nicht mehr von p abhängen. $\longrightarrow$

$$F_5 = pq + g(t)$$

Bis auf $g(t)$ ist dies eindeutig. Letztere Funktion ist aber irrelevant, da sie wie eine totale Ableitung zu K beiträgt: $\frac{\partial g(t)}{\partial t} = \frac{dg(t)}{dt}$

Ist umgekehrt $F_5 = qp$ gegeben, dann folgt

$$p - P\frac{\partial Q}{\partial q} = p\,, \qquad -P\frac{\partial Q}{\partial p} = q$$

Aus der ersten Gleichung folgt $Q = f(p,t)$, damit aus der zweiten $P = -\frac{q}{\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)}$. Es ergibt sich also eine Klasse von Transformationen.

Die Erzeugenden F_1 und F_2

$$F_1 = F_1(q,Q,t) \longrightarrow \frac{dF_1}{\partial t} = \sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial F_1}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i}\dot{Q}_i\right) + \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

$$= \left[\sum_{i=1}^{f}\dot{q}_i p_i - H(p,q,t)\right] - \left[\sum_{i=1}^{f}\dot{Q}_i(q,Q,t)P_i(q,Q,t) - K(Q(q,Q,t),P(q,Q,t),t)\right]$$

$$= \sum_{i=1}^{f}\left[p_i\dot{q}_i - P_i\dot{Q}_i\right] - H + K$$

Koeffizientenvergleich $\longrightarrow$

$$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i}, \quad -P_i = \frac{\partial F_1}{\partial Q_i}, \quad K = H + \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

Wiederum gilt: Eine Phasenraumtransformation ist genau dann kanonisch, wenn ein F_1 existiert, welches diese Gleichungen erfüllt.
Bei gegebenem F_1 sind die Gleichungen für P und Q algebraisch mit eindeutigen Lösungen.

Beispiel $F_1 \longrightarrow$ Transformation

$$F_1(q,Q) = -\frac{Q}{q} \longrightarrow \begin{array}{l} p = \dfrac{\partial F_1}{\partial q} = \dfrac{Q}{q^2} \Longrightarrow Q = pq^2 \\ P = -\dfrac{\partial F_1}{\partial Q} = \dfrac{1}{q} \end{array}$$

Beispiel Transformation $\longrightarrow F_1$

$Q = \log p, \quad P = -pq$ für $q, p > 0$

$$F_1(q,Q,t) = \int dq\; p(q,Q) + g(Q,t) = q\, e^{Q} + g(Q,t)$$

Andererseits muß gelten:

$$-P = pq = \frac{\partial F_1}{\partial Q} = q\, e^{Q} + \frac{\partial g}{\partial Q} = qp + \frac{\partial g}{\partial Q} \Longrightarrow \frac{\partial g}{\partial Q} = 0$$

Bis auf beliebiges $g(t)$ ist also

$$F_1(q,Q) = q\, e^{Q}$$

Nun zu $F_2 \equiv F_2(q,P,t)$

Zum Zweck einer späteren Umformung schreiben wir zunächst $\hat{F}_2$ und

$$\frac{d}{dt}\hat{F}_2(q,P,t) = \sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial \hat{F}_2}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial \hat{F}_2}{\partial P_i}\dot{P}_i\right) + \frac{\partial \hat{F}_2}{\partial t}$$

$$= \sum_{i=1}^{f}\left[p_i\dot{q}_i - P_i\dot{Q}_i\right] - H + K$$

$$= \sum_{i=1}^{f}\left[p_i\dot{q}_i - P_i\sum_{k=1}^{f}\left(\frac{\partial Q_i}{\partial q_k}\dot{q}_k + \frac{\partial Q_i}{\partial P_k}\dot{P}_k\right) - P_i\frac{\partial Q_i}{\partial t}\right] - H + K$$

$\longrightarrow$ q & P sind die unabhängigen Variablen

$$\frac{\partial \hat{F}_2}{\partial q_i} = p_i - \sum_{j=1}^{f} P_j\frac{\partial Q_j}{\partial q_i} \iff p_i = \frac{\partial}{\partial q_i}\left(\hat{F}_2 + \sum_{j=1}^{f} P_j Q_j\right)$$

$$\frac{\partial \hat{F}_2}{\partial P_i} = -\sum_{j=1}^{f} P_j\frac{\partial Q_j}{\partial P_i} \iff 0 = \frac{\partial}{\partial P_i}\left(\hat{F}_2 + \sum_{j=1}^{f} P_j Q_j\right) - Q_i$$

$$K = H + \sum_{i=1}^{f} P_i\frac{\partial Q_i}{\partial t} + \frac{\partial \hat{F}_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\left(\hat{F}_2 + \sum_{i=1}^{f} P_i Q_i\right)$$

Es ist also offenbar günstig zu definieren:

$$F_2(q,P,t) := \hat{F}_2(q,P,t) + \sum_{i=1}^{f} P_i Q_i(q,P,t) \Longrightarrow$$

$$p_i = \frac{\partial}{\partial q_i}F_2(q,P,t), \quad Q_i = \frac{\partial}{\partial P_i}F_2(q,P,t), \quad K = H + \frac{\partial}{\partial t}F_2(q,P,t)$$

Abermals ist eine Transformation genau dann kanonisch, wenn sich ein F_2 finden läßt, welches diese Gleichungen erfüllt.

Beispiel Transformation $\longrightarrow F_2$

$$Q = \log p \qquad P = -qp \qquad \text{mit } qp > 0$$

$$\longrightarrow F_2(q,P) = \int dq\, p(q,P) + g(P)$$

$$= -\int dq\, \frac{P}{q} + g(P) = -P \log q + g(P)$$

$$\frac{\partial F_2(q,P)}{\partial P} = Q = \log p = \log\left(-\frac{P}{q}\right) = -\log q + \frac{\partial g}{\partial P}$$

$$\Longrightarrow \frac{\partial g}{\partial P} = \log(-P) \Longrightarrow g(P) = P \log(-P) - P$$

$$\Longrightarrow F_2 = P\left[\log\left(-\frac{P}{q}\right) - 1\right]$$

Zusammenhang zwischen F_1 und F_2

$$\sum_{i=1}^{f}\left[p_i \dot{q}_i - P_i \dot{Q}_i\right] - H + K = \frac{dF_1}{dt} = \frac{d\hat{F}_2}{dt}$$

$$\Longrightarrow F_1 = \hat{F}_2 + \text{const.}$$

↳ wähle $\equiv 0$

$$\Longrightarrow$$

$$F_2(q,P,t) = F_1(q,Q,t) - \sum_{i=1}^{f} \overbrace{\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}}^{=-P_i} Q_i$$

$$= F_1(q, Q(q,P,t)) + \sum_{i=1}^{f} P_i\, Q_i(q,P,t)$$

$\longrightarrow$ F_1 und F_2 sind Legendretransformierte.

Zusammenfassung:

$F_1(q,Q,t)$	$p=\frac{\partial F_1}{\partial q}$	$P=-\frac{\partial F_1}{\partial Q}$
$F_2(q,P,t)$	$p=\frac{\partial F_2}{\partial q}$	$Q=\frac{\partial F_2}{\partial P}$
$F_3(p,Q,t)$	$q=-\frac{\partial F_3}{\partial p}$	$P=-\frac{\partial F_3}{\partial Q}$
$F_4(p,P,t)$	$q=-\frac{\partial F_4}{\partial p}$	$Q=\frac{\partial F_4}{\partial P}$

Beispiel Harmonischer Oszillator

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{m}{2}\omega^2 q^2 \quad \text{mit} \quad \omega^2=\frac{k}{m}$$

Mit $F_1(q,Q)=\frac{m}{2}\omega q^2 \cot Q$ erhalten wir

$$p=\frac{\partial F_1}{\partial q}=m\omega q \cot Q$$

$$P=-\frac{\partial F_1}{\partial Q}=-\frac{m\omega q^2}{2}\,\frac{-\sin^2 Q-\cos^2 Q}{\sin^2 Q}=\frac{m\omega q^2}{2\sin^2 Q}$$

$\Longrightarrow$ Die kanonische Transformation lautet

$$q=\sqrt{\frac{2P}{m\omega}}\sin Q\ , \qquad p=\sqrt{2m\omega P}\cos Q$$

$$K(Q,P)=H[q(Q,P),p(Q,P)]=\omega P(\cos^2 Q+\sin^2 Q)=\omega P$$

$\Longrightarrow$ Q ist eine zyklische Koordinate

$$\dot{Q}=\frac{\partial K}{\partial P}=\omega\ , \qquad \dot{P}=-\frac{\partial K}{\partial Q}=0$$

$$\Longrightarrow Q=\omega t+\alpha\ , \qquad P=\frac{K}{\omega}=\frac{E}{\omega}=\text{const.}$$

Im ursprünglichen Konfigurationsraum:

$$q(t) = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \sin(\omega t + \alpha)$$

Die Lösung der Bewegungsgleichungen wurde zwar vereinfacht – jedoch ist das Auffinden von Transformationen, welche zu zyklischen Koordinaten führen, systematisch nur schwer durchführbar. Die kanonischen Transformationen liegen jedoch dem Hamilton-Jacobi-Formalismus zugrunde, welcher in der Lösung komplizierterer Probleme Anwendung findet.

5.6 Kanonische Invarianten

Lagrange-Klammern

Für $2f$ unabhängige Funktionen $u_k(p, q, t)$, $k = 1, \dots, 2f$ sind diese definiert als

$$\{u_k, u_l\}_{q,p} = \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial q_i}{\partial u_k} \frac{\partial p_i}{\partial u_l} - \frac{\partial q_i}{\partial u_l} \frac{\partial p_i}{\partial u_k} \right)$$

Fundamentale Lagrange-Klammern

Wir erinnern an

$$p_i - \sum_{k=1}^{f} P_k \frac{\partial Q_k}{\partial q_i} = \frac{\partial F_5}{\partial q_i}$$

$$- \sum_{k=1}^{f} P_k \frac{\partial Q_k}{\partial p_i} = \frac{\partial F_5}{\partial p_i}$$

Mit $\dfrac{\partial^2 F_5}{\partial q_i \partial p_k} = \dfrac{\partial^2 F_5}{\partial p_k \partial q_i}$ folgt

$$\frac{\partial}{\partial q_i}\left[-\sum_{j=1}^{f} P_j \frac{\partial Q_j}{\partial p_k}\right] = \frac{\partial}{\partial p_k}\left[p_i - \sum_{j=1}^{f} P_j \frac{\partial Q_j}{\partial q_i}\right] \Longleftrightarrow$$

$$-\sum_{j=1}^{f}\left(\frac{\partial P_j}{\partial q_i}\frac{\partial Q_j}{\partial p_k} + P_j \frac{\partial^2 Q_j}{\partial q_i \partial p_k}\right) = \delta_{ik} - \sum_{j=1}^{f}\left(\frac{\partial P_j}{\partial p_k}\frac{\partial Q_j}{\partial q_i} + P_j \frac{\partial^2 Q_j}{\partial q_i \partial p_k}\right)$$

$$\Longleftrightarrow \sum_{j=1}^{f}\left(\frac{\partial Q_j}{\partial q_i}\frac{\partial P_j}{\partial p_k} - \frac{\partial Q_j}{\partial p_k}\frac{\partial P_j}{\partial q_i}\right) = \delta_{ik}$$

Mit der Lagrange-Klammer ist dies kurz

$$\{q_i, p_k\}_{Q,P} = \delta_{ik}$$

An dieser Rechnung sieht man auch, daß analog folgt:

$$\frac{\partial^2 F_5}{\partial q_i \partial q_k} = \frac{\partial^2 F_5}{\partial q_k \partial q_i} \Longrightarrow \{q_i, q_k\}_{Q,P} = 0$$

$$\frac{\partial^2 F_5}{\partial p_i \partial p_k} = \frac{\partial^2 F_5}{\partial p_k \partial p_i} \Longrightarrow \{p_i, p_k\}_{Q,P} = 0$$

Die Gültigkeit der fundamentalen Lagrange-Klammern sind also ein notwendiges Kriterium, eine Phasenraumtransformation als kanonisch zu identifizieren. Ohne Beweis merken wir an, daß die Gegenrichtung auch gilt, d.h. es handelt sich um ein notwendiges und hinreichendes Kriterium. Die fundamentalen Lagrange-Klammern gelten unabhängig von der spezifischen kanonischen Transformation. Man sagt, sie sind <u>kanonisch invariant</u>.

Die Lagrange-Klammern sind im folgenden Sinne inverse zu den Poisson-Klammern:

$$\sum_{k=1}^{2f} \{u_k, u_i\}_{q,p} [u_k, u_j]_{qp}$$

$$= \sum_{k=1}^{2f} \sum_{l,m=1}^{f} \left(\frac{\partial q_l}{\partial u_k} \frac{\partial p_l}{\partial u_i} - \frac{\partial q_l}{\partial u_i} \frac{\partial p_l}{\partial u_k} \right)\left(\frac{\partial u_k}{\partial q_m} \frac{\partial u_j}{\partial p_m} - \frac{\partial u_k}{\partial p_m} \frac{\partial u_j}{\partial q_m} \right) = \delta_{ij}$$

Beispielhaft betrachten wir den ersten der Produktterme:

$$\sum_{l,m=1}^{f} \frac{\partial u_j}{\partial p_m} \frac{\partial p_l}{\partial u_i} \sum_{k=1}^{2f} \frac{\partial q_l}{\partial u_k} \frac{\partial u_k}{\partial q_m} = \sum_{l,m=1}^{f} \frac{\partial u_j}{\partial p_m} \frac{\partial p_l}{\partial u_i} \underbrace{\frac{\partial q_l}{\partial q_m}}_{=\delta_{lm}}$$

$$= \sum_{l=1}^{f} \frac{\partial u_j}{\partial p_l} \frac{\partial p_l}{\partial u_i}$$

Der vierte Produktterm findet sich entsprechend mit $q \leftrightarrow p$. Zusammen ergibt sich:

$$\sum_{l=1}^{f} \left(\frac{\partial u_j}{\partial p_l} \frac{\partial p_l}{\partial u_i} + \frac{\partial u_j}{\partial q_l} \frac{\partial q_l}{\partial u_i} \right) = \delta_{ij}$$

Im zweiten und dritten Term treten Faktoren der Form $\sum_{k=1}^{2f} \frac{\partial p_l}{\partial u_k} \frac{\partial u_k}{\partial q_m} = \frac{\partial p_l}{\partial q_m} = 0$ auf, so daß diese verschwinden.

$$\Longrightarrow \sum_{k=1}^{2f} \{u_k, u_i\}_{q,p} [u_k, u_j]_{qp} = \delta_{ij}$$

Wir können nun zeigen:

$$\boxed{\text{Eine Transformation ist genau dann kanonisch, wenn die fundamentalen Poisson-Klammern erhalten bleiben.}}$$

Dazu betrachten wir

$Q_i = Q_i(q,p,t), \quad P_i = P_i(q,p,t)$

Wir wählen $u_\ell(q,p,t) = \begin{cases} Q_\ell(q,p,t) & \text{für } 1 \le \ell \le f \\ P_{\ell-f}(q,p,t) & \text{für } f+1 \le \ell \le 2f \end{cases}$

$$\longrightarrow \sum_{k=1}^{f} \{Q_k, u_i\}_{q,p} [Q_k, u_j]_{q,p} + \sum_{k=1}^{f} \{P_k, u_i\}_{q,p} [P_k, u_j]_{q,p} = \delta_{ij}$$

Fallunterscheidung nach Wertebereich von i, j

$i \le f$ und $j \le f \Longrightarrow u_i = Q_i, \quad u_j = Q_j$

$$\longrightarrow \sum_{k=1}^{f} \{Q_k, Q_i\}_{q,p} [Q_k, Q_j]_{q,p} + \sum_{k=1}^{f} \{P_k, Q_i\}_{q,p} [P_k, Q_j]_{q,p} = \delta_{ij}$$

Sind Q und P kanonisch, dann folgt mit den fundamentalen Lagrange-Klammern

$$\sum_{k=1}^{f} -\delta_{ki} [P_k, Q_j]_{q,p} = -[P_i, Q_j]_{q,p} = \delta_{ij}$$

$i \le f$ und $j > f \Longrightarrow u_i = Q_i, \quad u_j = P_j$

$\longrightarrow$

$$\sum_{k=1}^{f} \{Q_k, Q_i\}_{q,p} [Q_k, P_j]_{q,p} + \sum_{k=1}^{f} \{P_k, Q_i\}_{q,p} [P_k, P_j]_{q,p} = 0$$

Q & P kanonisch $\Longrightarrow$

$$\sum_{k=1}^{f} \delta_{ki} [P_k, P_j]_{q,p} = [P_i, P_j]_{q,p} = 0$$

$i > f$ und $j \leq f \Longrightarrow u_i = P_i \ , \ u_j = Q_j$

$\longrightarrow$

$$\sum_{k=1}^{f} \{Q_k, P_i\}_{q,p} [Q_k, Q_j]_{q,p} + \sum_{k=1}^{f} \{P_k, P_i\}_{q,p} [P_k, Q_j]_{q,p} = 0$$

Q & P kanonisch $\Longrightarrow [Q_i, Q_j]_{q,p} = 0$

Zum Beweis der Gegenrichtung: Gelten

$[Q_i, P_j]_{q,p} = \delta_{ij}$, $[Q_i, Q_j]_{q,p} = [P_i, P_j]_{q,p} = 0$, dann folgen mit den jeweils ersten Gleichungen in den Fallunterscheidungen die fundamentalen Lagrange-Klammern. Deren Invarianz ist notwendige und hinreichende Bedingung für eine kanonische Transformation.

Die Berechnung der fundamentalen Poissonklammern ist damit ein einfach zu prüfendes Kriterium für eine kanonische Transformation.

Kanonische Invarianz des Phasenraums

Variablentransformation in mehrdimensionalen Integralen:

$$\underbrace{\int_D d^n y \; g(y) = \int_{D'}}_{\text{Integrationsgebiet und transformiertes}} d^n x \; \underbrace{\det\left(\frac{\partial(y_1, \ldots, y_n)}{\partial(x_1, \ldots, x_n)}\right)}_{\text{Jacobi-Determinante}} g(y(x))$$

$$\frac{\partial(y_1, \ldots, y_n)}{\partial(x_1, \ldots, x_n)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial y_n}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Für eine kanonische Phasenraumtransformation behaupten wir nun:

$$\int dq_1 \cdots dq_f \, dp_1 \cdots dp_f = \int dQ_1 \cdots dQ_f \, dP_1 \cdots dP_f$$

Zu zeigen: Die Jacobi-Determinante ist gleich eins.

$$\det \frac{\partial(Q_1, \ldots, Q_f, P_1, \ldots, P_f)}{\partial(q_1, \ldots, q_f, p_1, \ldots, p_f)} = \frac{\det \dfrac{\partial(Q_1, \ldots, Q_f, P_1, \ldots, P_f)}{\partial(q_1, \ldots, q_f, Q_1, \ldots, Q_f)}}{\det \dfrac{\partial(q_1, \ldots, q_f, p_1, \ldots, p_f)}{\partial(q_1, \ldots, q_f, Q_1, \ldots, Q_f)}}$$

$$= (-1)^f \frac{\det \dfrac{\partial(P_1, \ldots, P_f, Q_1, \ldots, Q_f)}{\partial(q_1, \ldots, q_f, Q_1, \ldots, Q_f)}}{\det \dfrac{\partial(q_1, \ldots, q_f, p_1, \ldots, p_f)}{\partial(q_1, \ldots, q_f, Q_1, \ldots, Q_f)}}$$

$$= (-1)^f \frac{\det \left.\dfrac{\partial(P_1, \ldots, P_f)}{\partial(q_1, \ldots, q_f)}\right|_{Q=\text{const.}}}{\det \left.\dfrac{\partial(p_1, \ldots, p_f)}{\partial(Q_1, \ldots, Q_f)}\right|_{q=\text{const.}}} = 1$$

Im letzten Schritt haben wir benutzt, daß mit

$$p = \frac{\partial F_1}{\partial q}, \quad P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} \implies \frac{\partial P_j}{\partial q_i} = -\frac{\partial^2 F_1}{\partial Q_j \partial q_i} = -\frac{\partial p_i}{\partial Q_j}$$

Die Matrizen in den Zähler- und Nennerdeterminanten unterscheiden sich also durch das Vertauschen von Zeilen und Spalten sowie um einen Faktor -1, so daß der Bruch $(-1)^f$ ergibt.

5.7 Liouvillescher Satz

Zeittranslation als kanonische Transformation

Betrachte (für einen Freiheitsgrad)

$F_2(q, P, t) = qP + H(q, P, t)\, dt$

$$p = \frac{\partial F_2}{\partial q} = P + \frac{\partial H}{\partial q} dt = P - \dot{p}\, dt \iff P(p, q, t) = p + \dot{p}\, dt$$

$$Q = \frac{\partial F_2}{\partial P} = q + \frac{\partial H}{\partial P} dt = q + \dot{q}\, dt \iff Q(q, p, t) = q + \dot{q}\, dt$$

Bei vielen Freiheitsgraden lassen sich diese Transformationen separat für jeden Freiheitsgrad durchführen.

$\longrightarrow$

Zeittranslationen sind kanonische Transformationen.

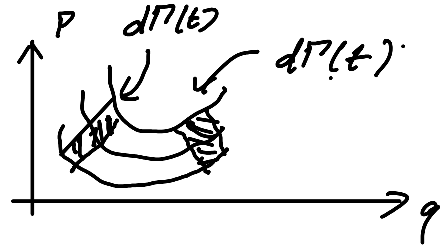
Wir betrachten jetzt eine Gesamtheit vieler Systeme an unterschiedlichen Punkten im Phasenraum.

Motivation:

* Statistische Physik: z.B. alle Punkte mit bestimmter innerer Energie, oder alle Punkte mit bestimmter Temperatur o.ä. Bedingungen.
* Mechanik: z.B. zur Beschreibung der Ungenauigkeit in der Kenntnis der Anfangsbedingungen.

Mit $d\Gamma(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f) = dq_1 \cdots dq_f\, dp_1 \cdots dp_f$ ist $\rho(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f, t)\, d\Gamma$ gleich die Zahl der Systeme im Phasenvolumen $d\Gamma$.

Gesamtzahl der Systeme:



$$\int_\Gamma d\Gamma\, g = G$$

$\longrightarrow$ Verteilungsfunktion $\varrho(q,p,t) = \dfrac{g(q,p,t)}{G}$

Letztere ist auch im Grenzfall unendlich vieler Punkte (kontinuierlicher Fall) wohldefiniert.

Da die Zahl der Systeme erhalten ist und auch mit der Zeit keine Systeme in das mitbewegte Volumenelement $d\Gamma$ hinein- oder hinausdringen (da sich Phasenkurven nicht überschneiden) ist

$$g\, d\Gamma\big|_{t_1} = g\, d\Gamma\big|_{t_2}$$

Das Phasenvolumen $d\Gamma$ ist wie oben gezeigt invariant unter kanonischen Transformationen und damit auch für den Spezialfall der Zeitentwicklung, d.h.

$$d\Gamma\big|_{t_1} = d\Gamma\big|_{t_2}$$

(Allerdings ändert sich i.A. die Form des Phasenraumelements.)

$$\longrightarrow \quad g\big|_{t_1} = g\big|_{t_2} \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{d}{dt} g = 0$$

Andererseits ist g eine Observable $\longrightarrow$

$$\frac{dg}{dt} = \{g, H\} + \frac{\partial g}{\partial t}$$

Da G eine Konstante ist, folgt schließlich das

Liouville-Theorem

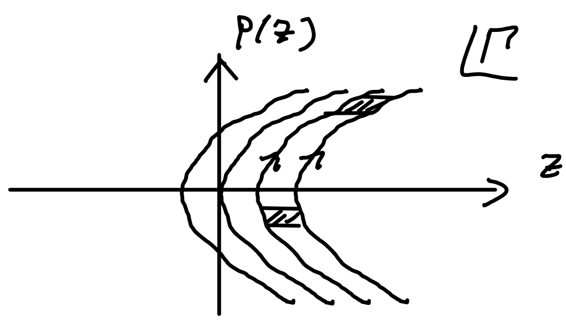
$$\boxed{\frac{d\varrho}{dt} = \{\varrho, H\} + \frac{\partial \varrho}{\partial t} = 0}$$

Der Phasenraum nimmt also unter allen Räumen aus Bahnkurven und deren Ableitungen eine Sonderstellung ein, da hier mit erhaltenen Wahrscheinlichkeiten gerechnet werden kann.

Das Auseinanderstreben von zunächst benachbarten Punkten ist ein Maß für die Vorhersagegenauigkeit bei nicht exakt bekannten Anfangsbedingungen (Schlagworte: Nichtlinearität, Ljapunov Exponent, Chaos).

Beispiel Phasenschar im Gravitationsfeld

$$H = E = \frac{p^2}{2m} - mg\,z \implies \text{Phasenbahnen}$$



$$p(z) = \pm\sqrt{2m(E + mg\,z)}$$

$$z = \frac{1}{mg}\left(\frac{p^2}{2m} - E\right)$$

Zur Zeit $t=0$ betrachten wir ein Phasenraumelement mit $p_1 \le p \le p_2$ und $E_1 \le E \le E_2$

$$\longrightarrow \Delta\Gamma = \int_{p_1}^{p_2} dp \int_{\frac{1}{mg}\left(\frac{p^2}{2m} - E_2\right)}^{\frac{1}{mg}\left(\frac{p^2}{2m} - E_1\right)} dz = \frac{E_2 - E_1}{mg}\,(p_2 - p_1)$$

Zeit t: $E_{1,2}(t) = E_{1,2}$

$$p_{1,2}(t) = p_{1,2} + mgt$$

$$\Delta\Gamma\Big|_t = \frac{E_2 - E_1}{mg}(p_2 + mgt - p_1 - mgt) = \Delta\Gamma\Big|_{t=0}$$

5.8 Hamilton-Jacobi-Formalismus

Betrachte

$$q_i(t) \longmapsto Q_i(q,p,t) = \text{const.}$$
$$p_i(t) \longmapsto P_i(q,p,t) = \text{const.}$$

Dies ist eine kanonische Transformation, wenn das zugehörige K identisch verschwindet, d.h.

$$K = H + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \,.$$

mit

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} = 0 \,, \qquad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} = 0$$

$\longrightarrow$ Triviale Bewegungsgleichungen, nichttriviales S.

Um S zu bestimmen, identifizieren wir es mit einer der Erzeugenden $F_{1,2}$ und erinnern an

$$F_1(q,Q,t)\,, \quad p = \frac{\partial F_1}{\partial q}\,, \qquad P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q}$$

$$F_2(q,P,t)\,, \quad p = \frac{\partial F_2}{\partial q}\,, \qquad Q = \frac{\partial F_2}{\partial P}$$

Wir dürfen dann $p_i = \dfrac{\partial S}{\partial q_i}$ setzen und erhalten die

Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$\boxed{H\left(q_1,\dots,q_f,\frac{\partial S}{\partial q_1},\dots,\frac{\partial S}{\partial q_f},t\right)+\frac{\partial S}{\partial t}=0}$$

Dabei heißt S Prinzipalfunktion.

Dies ist eine nichtlineare Differentialgleichung 1. Ordnung in den $f+1$ Variablen $q_1,\dots,q_f, t$.

Von den $f+1$ Integrationskonstanten ist eine rein additiv, da mit S auch $S+\alpha$ eine Lösung ist.

$\longrightarrow$ Schreibe $S = S(q_1,\dots,q_f,\alpha_1,\dots,\alpha_f,t)$

Wird eine Integrationskonstante mit $\alpha_i = Q_i$ identifiziert, dann ist $P_i = -\frac{\partial S}{\partial \alpha_i}$ (F_1-Fall).

Wird sie mit $\alpha_i = P_i$ identifiziert, dann ist $Q_i = \frac{\partial S}{\partial \alpha_i}$ (F_2-Fall).

Allgemein: $\frac{\partial S}{\partial \alpha_i} = \beta_i = \text{const.}$

Bestimmung der Prinzipalfunktion

(a) $H(p,q,t)$ aufstellen

(b) Hamilton-Jacobi-Gleichung $H(q,\frac{\partial S}{\partial t},t)+\frac{\partial S}{\partial t}=0$ aufstellen

(c) Separation der Hamilton-Jacobi-Gleichung (wenn möglich — dies ist der entscheidende Punkt) und Integration zur Lösung S.

(d) Bestimmung der Phasenbahnen aus den partiellen Ableitungen von S.

Beispiel Harmonischer Oszillator

(a) $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2} q^2$

(b) $\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2 + \frac{k}{2} q^2 + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$

(c) Energieerhaltung: $H = E = \text{const.} \longrightarrow$

separiere Zeit: $S = W(q, \alpha_1) - \alpha_1 t$ mit $\alpha_1 = -\frac{\partial S}{\partial t} = E$

Beachte: α_1 entspricht hier weder P noch Q — Bedeutung von $\frac{\partial S}{\partial \alpha_1}$ wird unten klar.

$\Longrightarrow$ Noch zu lösen: $\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W}{\partial q}\right)^2 + \frac{k}{2} q^2 = E$

$\longrightarrow \left(\frac{\partial W}{\partial q}\right)^2 = 2mE - mkq^2$ (Separation)

$$\longrightarrow S = W - Et = \sqrt{mk} \int^q dq' \sqrt{\frac{2E}{k} - q'^2} - Et$$

Zur Bestimmung der Phasenbahnen brauchen wir das Integral nicht zu lösen.

(d) $$\frac{\partial S}{\partial \alpha_1} = \frac{\partial S}{\partial E} = \sqrt{\frac{m}{k}} \int^q \frac{dq'}{\sqrt{\frac{2E}{k} - q'^2}} - t$$

$$= -t + \sqrt{\frac{m}{k}} \arcsin \sqrt{\frac{k}{2E}}\, q = \beta_1$$

$$\longrightarrow q(t) = \sqrt{\frac{2E}{k}} \sin\left[\sqrt{\frac{k}{m}}(t + \beta_1)\right]$$

Beispiel Zentralpotential

(a) $L = \frac{m}{2}\left(\dot{r}^2 + (r\dot{\varphi})^2\right) - V(r) \longrightarrow p_r = m\dot{r}\,,\quad p_\varphi = m r^2 \dot{\varphi}$

$$\longrightarrow \quad H = p_r \dot{r} + p_\varphi \dot{\varphi} - L = \frac{1}{2m}\left[p_r^2 + \frac{p_\varphi^2}{r^2}\right] + V(r)$$

(b) $$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\partial S}{\partial r}\right)^2 + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial S}{\partial \varphi}\right)^2\right] + V(r) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

(c) Ansatz: $S(r,\varphi,\alpha_1,\alpha_2,t) = W(r,\varphi,\alpha_1,\alpha_2) - \alpha_1 t$

$$\longrightarrow \frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\partial W}{\partial r}\right)^2 + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial W}{\partial \varphi}\right)^2\right] + V(r) = \alpha_1 = E$$

(Separation der Zeit)

Separationsansatz für r und φ:

$$W(r,\varphi,E,\alpha_2) = W_1(r,E,\alpha_2) + W_2(\varphi,E,\alpha_2)$$

$$\longrightarrow \left(\frac{\partial W_2}{\partial \varphi}\right)^2 = 2mr^2\left(E - V(r)\right) - r^2\left(\frac{\partial W_1}{\partial r}\right)^2 = \alpha_2$$

Linke Seite hängt nur von φ ab, rechte nur von r. $\longrightarrow$ Beide Seiten sind konstant — identifiziere diese mit der Integrationskonstante α_2.

$$\Longrightarrow \quad W_2 = \sqrt{\alpha_2}\,\varphi$$

$$W_1 = \int^{r} dr' \sqrt{2m\left(E - V(r')\right) - \frac{\alpha_2}{r'^2}}$$

Die Bedeutung von α_2 klärt sich mit

$$\frac{\partial S}{\partial \varphi} = \frac{\partial W_2}{\partial \varphi} = p_\varphi = \sqrt{\alpha_2}$$

$$\Longrightarrow \quad S = W_1 + W_2 - Et = \int^{r} dr' \sqrt{2m\left(E - V(r')\right) - \frac{p_\varphi^2}{r'^2}} + p_\varphi \varphi - Et$$

(d) $$\frac{\partial S}{\partial \alpha_1} = \frac{\partial S}{\partial E} = \int^{r} \frac{m\, dr'}{\sqrt{2m\left(E - V(r')\right) - \frac{p_\varphi^2}{r'^2}}} - t = \beta_1$$

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha_2} = \frac{\partial S}{\partial p_\varphi}\frac{\partial p_\varphi}{\partial \alpha_2} = \frac{1}{2\sqrt{\alpha_2}} \left\{ -\int^{r} \frac{p_\varphi\, dr'}{2r'^2 \sqrt{2m\left(E - V(r')\right) - \frac{p_\varphi^2}{r'^2}}} + \varphi \right\} = \beta_2$$

Aus der ersten Gleichung erhalten wir mit

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial S}{\partial E} = \left(\frac{2}{m}\left(E - V(r)\right) - \frac{p_\varphi^2}{m r^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \dot{r} - 1 = 0$$

$$\frac{d}{dt}\int^{r} dr' f(r') = f(r)\frac{dr}{dt}$$

$$\longrightarrow \quad \dot{r} = \sqrt{\frac{2}{m}\left(E - V(r)\right) - \frac{p_\varphi^2}{m r^2}}$$ wie im Kapitel 1

Die zweite Gleichung gibt zusätzlich den Zusammenhang zwischen r und φ.