6. Hamiltonische Formulierung

6.1 Kanonische Gleichungen

Die Lagrange-Funktion $L(q, \dot{q}, t)$ ist eine Funktion der generalisierten Koordinaten $q = (q_1 \dots q_f)$ und der generalisierten Geschwindigkeiten $\dot{q} = (\dot{q}_1 \dots \dot{q}_f)$. Die Lagrange-Gleichungen

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = 0, \qquad (\alpha = 1 \dots f) \tag{6.1}$$

bestimmen die Bewegungen $q(t)$ des Systems. Der generalisierte Impuls

$$p_\alpha = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \tag{6.2}$$

spielt in vielen Zusammenhängen eine wichtige Rolle, z.B. in der Quantenmechanik. Es ist daher wünschenswert, das mechanische System nicht als Funktion der generalisierten Variablen $(q, \dot{q})$, sondern als Funktion der *kanonischen* Variablen (q, p) zu formulieren. Zweck dieser Variablentransformation ist, die mechanische Bewegung im Phasenraum (q, p) statt im Konfigurationsraum zu untersuchen. Wir suchen also ein Potential, das uns die Phasenraumbewegungsgleichung in Analogie zu den Euler-Lagrange-Gleichungen liefert. Dieses Potential werden wir in der *Hamilton-Funktion* $H(q, p, t)$ finden, die aus der Lagrange-Funktion $L(q, \dot{q}, t)$ durch eine *Berührungstransformation* (auch Legendre-Transformation genannt) hervorgeht. In dieser Transformation wird die Ableitung einer Funktion nach einer Variablen $(\partial L/\partial \dot{q}_\alpha)$ durch eine neue Variable p_α ersetzt.

Legendre-Transformation

Die Frage nach dem Austausch von einem Satz von Koordinaten durch einen anderen gibt es in der Physik mehrfach (außer in der Mechanik vor allem in der Thermodynamik); man löst sie mithilfe der Legendre-Transformation.

Sei $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ eine zweimal stetig differenzierbare Funktion mit $f'' > 0$ und sei $u = f'(x)$. Dann ist $u = f'(x)$ invertierbar (da $u' = f'' > 0$ und daher

monoton wächst), und es gilt

$$x(u) = (f')^{-1}(u) \tag{6.3}$$

Wir suchen nun ein Potential für x als Funktion von u, d.h. eine Funktion $g(u)$, sodass

$$\frac{dg}{du} = (f')^{-1}(u) = x$$

(An dieser Stelle ist das Vorzeichen von $\pm x$ frei wählbar, und $+x$ ist die Konvention in der Mechanik.) Man findet g, indem man betrachtet:

$$df = u dx = d(xu) - x du$$

$$\curvearrowright d(xu - f) = x du$$

Also ist das gesuchte Potential

$$g(u) = x(u)u - f(x(u)) = xf'(x) - f\,,$$

und es gilt dann

$$\frac{dg}{du} = \frac{dx}{du}u + x - f'(x(u))\frac{dx}{du} = x$$

wegen $f'(x(u)) = u$.

Hängt die Funktion f noch von weiteren Variablen ab, muss man entsprechend die totalen Ableitungen durch partielle Ableitungen ersetzen:

Die Funktion $f(x_1, \dots, x_m; y_1, \dots, y_n)$ sei in allen x_i zweimal stetig differenzierbar, und es sei

$$\det\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_k \partial x_i}\right) \neq 0$$

Dann sind die Gleichungen

$$u_k = \frac{\partial f}{\partial x_k}(x_1, \dots, x_m; y_1, \dots, y_n), \qquad k = 1, \dots, m$$

lokal eindeutig nach den x_l auflösbar, d.h.

$$x_i = z_i(u_1, \dots, u_m; y_1, \dots, y_n), \qquad i = 1, \dots, m$$

Die Legendretransformierte ist dann definiert als

$$g(u_1, \dots, u_m; y_1, \dots, y_n) = \sum_{k=1}^{m} u_k z_k - f\,.$$

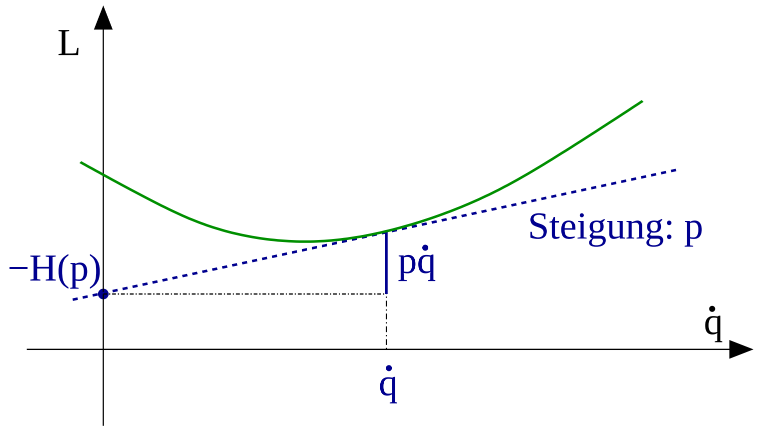

Abbildung 6.1: Graphische Interpretation der Legendre-Transformation $H(q,p,t) = p\dot{q} - L(q,\dot{q},t)$. Ziehen wir für festes q $p\dot{q}$ von $L(q,\dot{q},t$ ab so erhalten wir $-H(q,p,t)$.

Dann gilt

$$\frac{\partial g}{\partial u_k} = z_k; \quad \frac{\partial g}{\partial y_i} = -\frac{\partial f}{\partial y_i}; \quad \det\left(\frac{\partial^2 g}{\partial u_k \partial u_l}\right) \det\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}\right) = 1$$

Wie im eindimensionalen Fall ist die Legendretransformation umkehrbar eindeutig.

Kanonische Gleichungen

Um nun in der Lagrangefunktion $L(q,\dot{q},t)$ die Geschwindigkeiten $\dot{q}$ durch Impulse zu ersetzen, löst man das System von f Gleichungen (6.2) nach $\dot{q}$ auf und setzt die so gefundenen $\dot{q}_\alpha = \dot{q}_\alpha(q,p,t)$ in die Legendretransformierte der Lagrangefunktion, die Hamilton-Funktion

$$H(q,p,t) = \sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha - L(q,\dot{q},t) \tag{6.4}$$

ein. Wir bemerken, dass für autonome (d.h. zeitunabhängige) Systeme nach Kap. 4.7 die Hamilton-Funktion (6.4) gerade die erhaltene Gesamtenergie darstellt. Die Legendre-Transformation lässt sich auch graphisch deuten, wie Abb. 6.1 für eine Dimension verdeutlicht.

Wir suchen jetzt nach den Bewegungsgleichungen für die Hamiltonfunktion, die den Euler-Lagrange-Gleichungen für die Lagrangefunktion entsprechen.

Dazu berechnen wir das totale Differential von H:

$$dH = \sum_\alpha \left(\frac{\partial H}{\partial p_\alpha} dp_\alpha + \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} dq_\alpha\right) + \frac{\partial H}{\partial t} dt \tag{6.5}$$

Genauso können wir auch das totale Differential der rechten Seite von $H(q,p,t) = \sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha - L(q,\dot{q},t)$ bilden:

$$\begin{aligned} d\Big(\sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha - L(q,\dot{q},t)\Big) &= \sum_\alpha \left(\dot{q}_\alpha dp_\alpha + p_\alpha d\dot{q}_\alpha - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} dq_\alpha - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} d\dot{q}_\alpha\right) - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= \sum_\alpha \left(\dot{q}_\alpha dp_\alpha - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} dq_\alpha\right) - \frac{\partial L}{\partial t} dt \end{aligned} \tag{6.6}$$

Dabei haben wir $p_\alpha = \partial L/\partial \dot{q}_\alpha$ verwendet. Durch Koffizientenvergleich zwischen den Gleichungen (6.5) und (6.6) finden wir

$$\frac{\partial H}{\partial p_\alpha} = \dot{q}_\alpha; \qquad \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} = -\frac{\partial L}{\partial q_\alpha}; \qquad \frac{\partial H}{\partial t} dt = -\frac{\partial L}{\partial t} dt$$

und mit den Euler-Lagrange-Gleichungen $\dot{p}_\alpha = \partial L/\partial q_\alpha$ erhalten wir die *kanonischen Gleichungen* (Hamiltonsche Gleichungen)

$$\boxed{\dot{q}_\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}, \qquad \dot{p}_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}} \qquad (\alpha = 1 \dots f). \tag{6.7}$$

Dieses sind $2f$ Differentialgleichungen 1. Ordnung für die $2f$ Koordinaten

$$x = (x_1 \dots x_{2f}) \;\equiv\; (q_1\, p_1, q_2\, p_2, \dots, \dots q_f\, p_f) \tag{6.8}$$

im *Phasenraum* mit $x_{2j-1} = q_j$ und $x_{2j} = p_j$ $(j = 1, \dots f)$. Wir bemerken, dass die f Lagrange-Gleichungen (6.1) i.a. von 2. Ordnung sind. Eine ähnliche Umwandlung von f Differentialgleichungen 2. Ordnung in $2f$ Differentialgleichungen 1. Ordnung hatten wir schon in einem anderen Zusammenhang (Schwingungen) in Kap. 3 durchgeführt.

Das Hamiltonsche Prinzip im Phasenraum

Nach Definition (6.4) der Hamiltonfunktion gilt für die Lagrangefunktion

$$L(q,\dot{q},t) = \sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha - H(q,p,t)$$

Die Bewegungsgleichungen (6.7) sollten sich also auch aus dem Hamiltonschen Variationsprinzip

$$\delta \int_{(1)}^{(2)} dt \Big(\sum_\alpha p_\alpha \, \dot{q}_\alpha - H \Big) = 0$$

herleiten lassen, wobei die Koordinaten $q_\alpha(t_i)$ an den Endpunkten t_i vorgegeben sind. Das ist nicht ganz selbverständlich, da im Phasenraum q_α und p_α unabhängige Variable sind, während in der urspünglichen Formulierung des Variationsprinzips die Variation von $\dot{q}$ durch die von q vorgegeben ist. Es gilt aber:

$$\begin{aligned} \delta \int_{(1)}^{(2)} dt \Big(\sum_\alpha p_\alpha \, \dot{q}_\alpha - H \Big) &= \int_{(1)}^{(2)} dt \sum_\alpha \Big(p_\alpha \, \delta \dot{q}_\alpha + \dot{q}_\alpha \delta p_\alpha - \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} \delta q_\alpha - \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} \delta p_\alpha \Big) \\ &= \Big[p_\alpha \, \delta q_\alpha \Big]_{(1)}^{(2)} + \int_{(1)}^{(2)} dt \sum_\alpha \Big(\dot{p}_\alpha \, \delta q_\alpha + \dot{q}_\alpha \delta p_\alpha - \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} \delta q_\alpha - \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} \delta p_\alpha \Big) \\ &= \int_{(1)}^{(2)} dt \sum_\alpha \Big[\Big(\dot{q}_\alpha - \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} \Big) \delta p_\alpha - \Big(\dot{p}_\alpha + \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} \Big) \delta q_\alpha \Big] \end{aligned}$$

wobei wir in der ersten Zeile den ersten Term der rechten Seite partiell integriert haben. Die Variationen δq_α verschwinden an den Endpunkten (1) und (2). Also erhalten wir wieder die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen.

Allgemeine Vorgehensweise beim Hamilton-Formalismus

1. $L = T + V$ in generalisierten Koordinaten q, $\dot{q}$ aufstellen.
2. Generalisierte Impulse $p_\alpha = \partial L / \partial \dot{q}_\alpha$ berechnen.
3. Die Gleichungen $p_\alpha = z_\alpha(\dot{q}_\alpha)$ aus Schritt 2 invertieren, um die $\dot{q}_\alpha$ als Funktion der p_α zu bekommen.
4. Hamiltonfunktion $H = \sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha - L(q, \dot{q}, t)$ berechnen und Ã$\frac{1}{4}$berall die $\dot{q}_\alpha = \dot{q}_\alpha(p_\alpha)$ einsetzen.
5. Hamiltonsche Gleichungen aufstellen.

Beispiel: Teilchen im Potential

$$L = \frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^{\,2} - V(\vec{x}); \qquad \vec{p} = m \dot{\vec{x}}$$

$$H = \vec{p} \cdot \dot{\vec{x}} - L = \Big[\frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^{\,2} + V(\vec{x}) \Big]_{\dot{\vec{x}} = \vec{p}/m} = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{x})$$

Beispiel: Teilchen im elektromagnetischem Feld

$$L = \frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^{\,2} - e \left[\varphi(\vec{x}) - \frac{1}{c} \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}(\vec{x}) \right]; \qquad \vec{p} = m \dot{\vec{x}} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x})$$

$$H = \Big[\vec{p} \cdot \dot{\vec{x}} - L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}) \Big]_{\dot{\vec{x}} = (\vec{p} - e/c\vec{A})/m}$$

$$= \vec{p} \cdot \left(\frac{\vec{p} - e/c\vec{A}}{m} \right) - \frac{m}{2} \left(\frac{\vec{p} - e/c\vec{A}}{m} \right)^2 + e\varphi(\vec{x}) - \frac{e}{c} \left(\frac{\vec{p} - e/c\vec{A}}{m} \right) \cdot \vec{A}(\vec{x})$$

also

$$\boxed{H = \frac{(\vec{p} - e/c\vec{A})^2}{2m} + e\varphi(\vec{x})}$$

6.2 Phasenraum und Poisson-Klammern

Wir bezeichnen die $2f$ Variablen

$$x \equiv (x_1, \ldots, x_{2f}) \equiv (q_1, p_1, q_2, p_2, \ldots, q_f, p_f)$$

als die Phasenkoordinaten des Systems und den zugehörigen Raum als den Phasenraum. Ist der Konfigurationsraum der $\mathbb{R}^f$, dann ist der Phasenraum der $\mathbb{R}^{2f}$. Im Phasenraum können wir die Bewegungsgleichungen mithilfe eines antisymmetrischen Tensors umschreiben.

Antisymmetrischer Tensor

Wir führen den antisymmetrischen Tensor

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} 0 & -1 & & & & & & \\ 1 & 0 & & & & & 0 & \\ & & 0 & -1 & & & & \\ & & 1 & 0 & & & & \\ & & & & \ddots & & & \\ & & & & & & 0 & -1 \\ & 0 & & & & & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

ein. Er hat die Eigenschaft $\varepsilon^T = \varepsilon^{-1}$. Mit Hilfe der Komponenten ε_{ik} können wir die kanonischen Gleichungen kompakt als

$$\boxed{\sum_{k=1}^{2f} \varepsilon_{ik}\, \dot{x}_k = \frac{\partial H(x)}{\partial x_i}} \qquad (i = 1 \dots 2f) \tag{6.9}$$

schreiben. Also, z.B. für $i = 1$ ($x_1 = q_1$, $x_2 = p_1$)

$$-\dot{x}_2 = \frac{\partial H}{\partial x_1}, \qquad -\dot{p}_1 = \frac{\partial H}{\partial q_1}.$$

Oder für $i = 2$

$$\dot{x}_1 = \frac{\partial H}{\partial x_2}, \qquad \dot{q}_1 = \frac{\partial H}{\partial p_1}.$$

Sei nun $F(p, q)$ eine beliebige Funktion auf dem Phasenraum. Entlang einer physikalischen Bahn $\big(p(t), q(t)\big)$ ändert sich dann $F\big(p(t), q(t)\big)$ gemäß

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} F\big(p(t), q(t)\big) &= \sum_{\alpha=1}^{f} \left(\frac{\partial F}{\partial p_\alpha} \dot{p}_\alpha + \frac{\partial F}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha \right) \\ &= \sum_{\alpha=1}^{f} \left(-\frac{\partial F}{\partial p_\alpha} \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} + \frac{\partial F}{\partial q_\alpha} \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} \right) \end{aligned} \tag{6.10}$$

Für zwei beliebige Funktionen $F(x)$ und $G(x)$ auf dem Phasenraum $x = (q_1 p_1 \dots q_f p_f)$ definiert man nun den Ausdruck

$$\{F, G\} = \sum_{\alpha=1}^{f} \left(\frac{\partial F}{\partial q_\alpha} \frac{\partial G}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial F}{\partial p_\alpha} \frac{\partial G}{\partial q_\alpha} \right) \tag{6.11}$$

als die *Poisson-Klammer* von F und G.

Bewegungsgleichung

Betrachten wir eine Funktion $A(x, t)$ auf dem Phasenraum, dann ist die Ableitung durch

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

gegeben, wobei wir die kanonischen Gleichungen (6.7) verwendet haben. Also ist

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, H\}. \tag{6.12}$$

Falls A nicht explizit von der Zeit abhängig ist, also $A = A(x)$, dann ist A dann und genau dann eine Erhaltungsgröße, falls die Poissonklammer mit der Hamiltonfunktion verschwindet,

$$A(x) \text{ erhalten} \qquad \longleftrightarrow \qquad \{A, H\} = 0.$$

Offensichtlich ist H selber erhalten, denn

$$\frac{dH}{dt} = \{H, H\} = \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = 0.$$

Setzt man die Koordinate q_j anstelle von A in (6.12) ein, so erhält man

$$\frac{dq_j}{dt} = \{q_j, H\} = \sum_{i=1}^{f} \left(\underbrace{\frac{\partial q_j}{\partial q_i}}_{=\delta_{ij}} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \underbrace{\frac{\partial q_j}{\partial p_i}}_{=0} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = \frac{\partial H}{\partial p_j},$$

also, wie erwartet, die Bewegungsgleichung für q_j. Analog erhalten wir für p_j

$$\frac{dp_j}{dt} = \{p_j, H\} = \sum_{i=1}^{f} \left(\underbrace{\frac{\partial p_j}{\partial q_i}}_{=0} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \underbrace{\frac{\partial p_j}{\partial p_i}}_{=\delta_{ij}} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = -\frac{\partial H}{\partial q_j}.$$

Also lässt sich die gesamte Hamiltonische Dynamik mit Hilfe der Poissonklammern schreiben.

Rechenregeln

Folgende Rechenregeln gelten für die Poissonklammern:

$$\begin{aligned} &\text{Antisymmetrie} & \{\varphi, \psi\} &= -\{\psi, \varphi\}, \\ &\text{Linearität} & \{\varphi_1 + \varphi_2, \psi\} &= \{\varphi_1, \psi\} + \{\varphi_2, \psi\}, \end{aligned}$$

und die *Jacobi-Identität*

$$\{\{\varphi, \psi\}, \chi\} + \{\{\psi, \chi\}, \varphi\} + \{\{\chi, \varphi\}, \psi\} = 0.$$

Die Poissonklammern für Impuls- und Ortskoordinaten, auch als *fundamentale Poissonklammern* bezeichnet, lauten

$$\{q_\alpha, q_\beta\} = 0, \qquad \{p_\alpha, p_\beta\} = 0, \qquad \{q_\alpha, p_\beta\} = \delta_{\alpha\beta} \tag{6.13}$$

Das ist leicht nachzurechnen, z.B. für die letzte Beziehung

$$\{q_\alpha, p_\beta\} = \sum_{\gamma=1}^{f} \left(\underbrace{\frac{q_\alpha}{q_\gamma}}_{=\delta_{\alpha\gamma}} \underbrace{\frac{p_\beta}{p_\gamma}}_{=\delta_{\beta\gamma}} - \underbrace{\frac{q_\alpha}{p_\gamma}}_{=0} \underbrace{\frac{p_\beta}{q_\gamma}}_{=0} \right) = \delta_{\alpha\beta}\,.$$

6.3 Quantenmechanik

An dieser Stelle ein kleiner Ausblick auf die Quantenmechanik, die kein eigentlicher Stoff dieser Vorlesung ist. Man mag sich fragen, was es denn soll, dass man eine Formulierung der Mechanik nach der anderen entwickelt, also die

– Newtonsche Mechanik

– Lagrange-Mechanik

– Hamiltonische Mechanik,

wenn man doch mit der Lagrange-Formulierung schon im wesentlichen alles berechnen kann. Wie wir gesehen haben liegt die Bedeutung der Hamiltonischen Mechanik zum einen in der Ästhetik, der vollkommenen Äquivalenz von Symmetrie und Bewegung (siehe unten, Kap. 6.4). Eine weitere und heutzutage sehr viel wichtigere Bedeutung der Hamiltonischen Mechanik ist ihre Bedeutung als Ausgangspunkt zum Übergang zur Quantenmechanik. Diesen Zusammenhang wollen wir nun kurz beschreiben, auch wenn man ihn vollständig erst nach dem Studium der Quantenmechanik verstehen kann.

Quantisierung

Allgemein stellt sich das Problem: Gegeben ist ein gewisses klassisches System - wie *quantisiere* ich es? Gesucht ist also eine quantenmechanische Beschreibung, die im *klassischen Grenzfall* (Plancksches Wirkungsquantum $\hbar \to 0$) die gegebenen klassischen Gleichungen reproduziert.

Ganz allgemein betrachtet man in der Quantenmechanik nicht den Phasenraum, sondern den Hilbertraum, der der Raum aller Funktionen $f(q_1 \dots q_f)$ ist. Weiter werden generell alle Funktionen auf dem Phasenraum zu Operatoren auf dem Hilbertraum (Operatoren sind in geeigneter Basis Matrizen).

Ebenso wie nun die Poissonklammer die mathematische Struktur des Phasenraums für die Mechanik bestimmt, so stellt der Kommutator von zwei Operatoren $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ die Klammer da, die dem Hilbertraum die mathematische Struktur der Quantenmechanik verleiht. Der Unterschied zwischen klassischer und Quanten-Mechanik liegt also in den zwei Realisierungen der abstrakten Klammer, die den jeweiligen Räumen die mathematische Struktur verleihen.

Korrespondenzprinzip

Der Übergang Hamilton-Mechanik $\to$ Quantenmechanik (Quantisierung) geht von den *kanonisch konjungierten* Variablen q_i und p_i aus. Dabei gelten folgende Äquivalenzen.

	Mechanik	Quantenmechanik
1.	Phasenraum	Hilbertraum
2.	$A(q_i, p_i)$	linearer hermitescher Operator $\hat{A}$
3.	Messgröße (Observable)	Eigenwert (Erwartungswert) des Operators
4.	Hamiltonfunktion H	Hamiltonoperator $\hat{H}$
5.	q_i, p_i	Operatoren $\hat{q}_i$, $\hat{p}_i$
6.	Poissonklammer $\{A, B\}$	Kommutator $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$
7.	$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$	$\frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = \delta_{ij}$
8.	$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, H\}$	$\frac{d}{dt}\hat{A} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}, \hat{H}]$

Diese Tabelle beschreibt das sogenannte *Korrespondenzprinzip.*

6.4 Kanonische Transformationen

Wir betrachten alle solche Transformationen des Phasenraumes

$$(x_1 \dots x_{2f}) \mapsto (y_1 \dots y_{2f}) = (y_1(x) \dots y_{2f}(x))$$

auf sich, die die kanonischen Gleichungen (6.7) invariant lassen. Eine Motivation, eine solche *kanonische Transformation* durchzuführen, ist die Aussicht, dass nach der Transformation die Bewegungsgleichungen besonders einfach sind.

Jacobi-Matrizen

Die Invarianz der kanonischen Gleichungen ist also mit

$$\sum_{k=1}^{2f} \varepsilon_{ik} \frac{dy_k}{dt} = \frac{\partial H}{\partial y_i}, \qquad (i = 1 \dots 2f) \tag{6.14}$$

gleichbedeutend. Um festzustellen für welche $y = y(x)$ (6.14) erfüllt ist, müssen wir (6.14) auf $x-$Koordinaten transformieren.

$$\sum_{k,l} \varepsilon_{ik} \frac{\partial y_k}{\partial x_l} \dot{x}_l = \sum_k \underbrace{\frac{\partial H}{\partial x_k}}_{\sum_l \varepsilon_{kl} \dot{x}_l} \frac{\partial x_k}{\partial y_i},$$

also nach Vertauschen der Summationsreihenfolge

$$\sum_l \left(\sum_k \varepsilon_{ik} \frac{\partial y_k}{\partial x_l} \right) \dot{x}_l = \sum_l \left(\sum_k \varepsilon_{kl} \frac{\partial x_k}{\partial y_i} \right) \dot{x}_l .$$

Diese Gleichung muss für alle l gelten. Wir definieren die Jacobi-Matrix A als Matrix aller erster partieller Ableitungen:

$$A_{kl} = \frac{\partial y_k}{\partial x_l}, \qquad \left(A^{-1}\right)_{ki} = \frac{\partial x_k}{\partial y_i}, \tag{6.15}$$

denn

$$\sum_l A_{kl} \left(A^{-1}\right)_{li} = \sum_l \frac{\partial y_k}{\partial x_l} \frac{\partial x_l}{\partial y_i} = \frac{\partial y_k}{\partial y_i} = \delta_{ki} .$$

Wir finden somit

$$\sum_k \varepsilon_{ik} A_{kl} = \sum_k \varepsilon_{kl} \left(A^{-1}\right)_{ki} = \sum_k \left(A^{-1}\right)^T_{ik} \varepsilon_{kl},$$

was wir in Matrixform als

$$\varepsilon A = (A^{-1})^T \varepsilon = (A^T)^{-1} \varepsilon$$

schreiben können. Wir finden somit für die *symplektischen Matrizen* A die Bedingung

$$\boxed{A^T \varepsilon A = \varepsilon} \tag{6.16}$$

Symplektische Matrizen sind genau durch diese Gleichung definiert, in Worten: sie lassen eine antisymmetrische Bilinearform invariant. Die symplektischen Matrizen A bilden eine Gruppe und aus (6.16) folgt

$$|\det A| = 1, \tag{6.17}$$

es gilt sogar $\det A = +1$, was wir hier nicht beweisen. Eine Koordinatentransformation $(x_1 \dots x_{2f}) \mapsto (y_1 \dots y_{2f})$ heißt kanonisch, falls ihre Jacobi Matrix (6.15) symplektisch ist. Für eine gegebene Koordinatentransformation $y = y(x)$ im Phasenraum zeigt man also, dass sie kanonisch ist, indem man ihre Jacobi-Matrix $A(y)$ berechnet und für diese die Gültigkeit von Gl. (6.16) nachweist.

Beispiel: Transformation der Lagekoordinaten

Beliebige Transformationen

$$(q_1 \dots q_f) \ \mapsto \ (Q_1 \dots Q_f), \tag{6.18}$$

der Lagekoordinaten (sogenannte *Punkttransformationen*) sind bei entsprechender Transformation der Impulse

$$(p_1 \dots p_f) \ \mapsto \ (P_1 \dots P_f), \tag{6.19}$$

kanonische Transformationen. Begründung: Die Lagrange-Gleichungen sind invariant unter beliebigen Transformationen der Art (6.18), genauer: Es seien

$$Q_\alpha = Q_\alpha(q_1, \dots, q_f, t), \qquad q_\beta = q_\beta(Q_1, \dots, Q_f, t), \qquad \alpha, \beta = 1, \dots, f$$

Dann folgt aus

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} = \frac{\partial L}{\partial q_\alpha}, \qquad \alpha = 1, \dots, f$$

für $\tilde{L}(Q, \dot{Q}, t) = L(q(Q,t), \dot{q}(Q, \dot{Q}, t), t)$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{Q}_\beta} = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial Q_\beta}, \qquad \beta = 1, \dots, f$$

(für den Beweis, siehe z.B. Nolting). Damit sind nach der Legendre-Transformation (6.4) auch die kanonischen Gleichungen (6.7) forminvariant unter beliebigen Punkttransformationen. Die Transformation (6.19) der Impulse ist dabei durch

$$P_\alpha = \frac{\partial}{\partial \dot{Q}_\alpha} L(Q, \dot{Q}) = \sum_\beta \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\beta}}_{p_\beta} \underbrace{\frac{\partial \dot{q}_\beta}{\partial \dot{Q}_\alpha}}_{\frac{\partial q_\beta}{\partial Q_\alpha}} + \sum_\beta \frac{\partial L}{\partial q_\beta} \underbrace{\frac{\partial q_\beta}{\partial \dot{Q}_\alpha}}_{=0} = \sum_\beta p_\beta \frac{\partial q_\beta}{\partial Q_\alpha}, \tag{6.20}$$

gegeben, denn $(q, \dot{q})$ und $(Q, \dot{Q})$ sind unabhängige Variablen und somit $\partial q_\beta / \partial \dot{Q}_\alpha = 0$.

Die Klasse der kanonischen Transformationen ist jedoch sehr viel größer als (6.18), insbesondere können auch Lagekoordinaten und Impulse vermischt werden. Dies ist ein Vorzug der Hamiltonischen Formulierung.

6.5 Kanonische Flüsse

Ganz analog zur Definition eines Flusses in Kap. 4.5 ist im Phasenraum $x = (q_1 p_1 \dots q_f p_f)$ ein Fluss ϕ^λ mit

$$\phi^\lambda \ : x \longmapsto y(x, \lambda) = \phi^\lambda(x)$$

eine ein-parametrige Schar von Abbildungen. Jeder Fluss definiert ein Vektorfeld

$$v_i(x) = \frac{d}{d\lambda}\phi_i^\lambda(x), \qquad (i = 1 \dots 2f).$$

Umgekehrt definiert ein Vektorfeld $v(y)$ via

$$\frac{dy_i}{d\lambda} = v_i(y), \qquad (i = 1 \dots 2f) \tag{6.21}$$

zu jeder Anfangsbedingung $y_i(x, 0) = x_i$ einen Fluss $x \mapsto y(x, \lambda)$.

Vektorfelder

Ziel der folgenden Überlegungen ist es, diejenigen Vektorfelder zu charakterisieren, die via (6.21) *kanonische Flüsse* erzeugen, also solche Flüsse, für die die Jacobi Matrix

$$A_{ik}(\lambda) = \frac{\partial}{\partial x_k} y_i(x, \lambda)$$

für alle Werte des Schar-Parameters λ symplektisch ist, also (6.16) erfüllt. Nach (6.21) gilt

$$\dot{A}_{ik} \equiv \frac{\partial A_{ik}}{\partial \lambda} = \frac{\partial}{\partial \lambda}\frac{\partial}{\partial x_k} y_i(x, \lambda) = \frac{\partial}{\partial x_k} v_i(y) = \sum_l \underbrace{\frac{\partial v_i}{\partial y_l}}_{V_{il}} \underbrace{\frac{\partial y_l}{\partial x_k}}_{A_{lk}},$$

also

$$\dot{A}_{ik} = \sum_l V_{il} A_{lk} \qquad \text{oder} \qquad \dot{A} = VA$$

in Matrixnotation. Um die Bedingung für diejenigen $v(y, \lambda)$ zu finden, für die der erzeugte Fluss kanonisch ist, bemerken wir zunächst, dass für $\lambda = 0$ die Jacobi-Matrix A die Einheitsmatrix ist und somit trivialerweise symplektisch ist (denn $y(x, 0) = x$ definiert die Anfangsbedingung). Damit die Bedingung (6.16)

$$A^T(\lambda)\, \varepsilon\, A(\lambda) = \varepsilon$$

für alle λ erfüllt ist, genügt es also, dass

$$\begin{aligned} 0 = \frac{d}{d\lambda}\left(A^T \varepsilon A\right) &= (VA)^T \varepsilon A + A^T \varepsilon V A \\ &= A^T V^T \varepsilon A + A^T \varepsilon V A = A^T \left(V^T \varepsilon + \varepsilon V\right) A \end{aligned}$$

für alle λ erfüllt ist. Wegen $\det A \neq 0$ ist dies mit

$$V^T \varepsilon + \varepsilon V = 0$$

äquivalent, und wegen $\varepsilon^T = -\varepsilon$ zu

$$-V^T \varepsilon^T + \varepsilon V = 0, \qquad (\varepsilon V)^T = \epsilon V,$$

d.h. (da ε konstant ist)

$$(\varepsilon V)_{ki} = \sum_l \varepsilon_{kl} V_{li} = \sum_l \varepsilon_{kl} \frac{\partial}{\partial y_i} v_l(y) = \frac{\partial}{\partial y_i} \underbrace{\sum_l \varepsilon_{kl}\, v_l(y)}_{\equiv g_k(y)}$$

und

$$(\varepsilon V)^T_{ki} = \sum_l \varepsilon_{il} V_{lk} = \sum_l \varepsilon_{il} \frac{\partial}{\partial y_k} v_l(y) = \frac{\partial}{\partial y_k} \underbrace{\sum_l \varepsilon_{il}\, v_l(y)}_{\equiv g_i(y)}.$$

Aus $(\varepsilon V)^T = \epsilon V$ folgt somit dass

$$\frac{\partial}{\partial y_i} g_k(y_1 \dots y_{2f}) = \frac{\partial}{\partial y_k} g_i(y_1 \dots y_{2f})$$

Deshalb muss $g(y)$ der Gradient einer Funktion $G(y)$ sein (vergleiche Kap. 1.7, Gl. (1.18)), also

$$\frac{\partial}{\partial y_i} G(y) = g_i(y) = \sum_l \varepsilon_{il}\, v_l(y)$$

und damit

$$\boxed{\sum_{k=1}^{2f} \varepsilon_{ik} \frac{dy_k}{d\lambda} = \frac{\partial G(y)}{\partial y_i}} \qquad (i = 1 \dots 2f). \tag{6.22}$$

Fazit: Die Differentialgleichung $dy_i/d\lambda = v_i(y)$, die kanonische Flüsse charakterisiert, hat die Form von kanonischen Gleichungen (Gl. (6.22)), wobei λ die Rolle der Zeit und G die der Hamiltonfunktion spielt. Man kann die obige Schlussweise auch umkehren und folgern, dass $y(x, \lambda)$ dann und genau dann ein kanonischer Fluss ist, falls eine Funktion $G(y)$ auf dem Phasenraum existiert, so dass (6.22) erfüllt ist, d.h. kanonische Gleichungen erzeugen kanonische Flüsse auf dem Phasenraum. $G(y)$ heißt erzeugende Funktion des kanonischen Flusses. Nun sind aber (6.22) mit den Hamiltonischen Bewegungsgleichungen (6.9) nach der Vertauschung

$$x \longleftrightarrow y, \qquad t \longleftrightarrow \lambda, \qquad H(x) \longleftrightarrow G(y) \tag{6.23}$$

vollkommen äquivalent; *"Die Differentialgleichungen kanonischer Flüsse sind also die kanonischen Gleichungen"*. Ein spezieller kanonischer Fluss ist die Bewegungsabbildung $\phi^t(x)$ eines autonomen Hamiltonischen Systems, also der Propagator der Hamiltonischen Bewegungsgleichungen (6.9).

6.6 Erzeugende für kanonische Transformationen

Es gibt Rechenvorschriften, die erlauben, aus sogenannten *Erzeugenden* für kanonische Transformationen gültige kanonische Transformationen herzuleiten. Der Vorteil hierin liegt in der Tatsache, dass diese Erzeugenden frei wählbar sind, und es somit möglich ist, einfach mal auszuprobieren, ob eine gewisse Erzeugende, bzw. die aus ihr resultierende kanonische Transformation die Bewegungsgleichungen vereinfacht.

Nach (6.4) ist

$$H(q,p,t) = \sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha - L(q,\dot{q},t),$$

bzw.

$$L(q,\dot{q},t) = \sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha - H(q,p,t).$$

Das Prinzip der kleinsten Wirkung besagt nun, dass die Bewegungsgleichungen bei einer Transformation

$$(q_1 p_1, \dots q_f, p_f) \longmapsto (Q_1 P_1, \dots Q_f, P_f); \tag{6.24}$$

und

$$H(p,q,t) \longmapsto H'(P,Q,t) \tag{6.25}$$

erhalten bleiben, falls die Variationen

$$\delta \int dt \left[\sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha - H(q,p,t)\right]$$

$$= \delta \int dt \left[\sum_\alpha P_\alpha \dot{Q}_\alpha - H'(Q,P,t)\right] = 0$$

dieselben sind. Da die Variation nun eine Variation über alle Wege mit festen Anfangs- und Endzeiten ist (siehe Kap. 4.4), heißt dies nun, dass die entsprechenden Integranden bis auf eine totale Ableitung übereinstimmen müssen (Äquivalenztransformation),

$$\sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha - H(q,p,t) = \sum_\alpha P_\alpha \dot{Q}_\alpha - H'(Q,P,t) + \frac{d}{dt} F(q,p,Q,P,t),$$

wobei $F(q,p,Q,P,t)$ eine beliebige Funktion sein kann, die aber nur von $2f$ der $4f$ Variablen q,p,Q,P abhängt, da nur $2f$ Variablen unabhängig voneinander sein können. Es gibt vier Möglichkeiten, zwei der vier Variablensätze

q,p,Q,P zu kombinieren; diese schreibt man in der Form

$$F_1(q,Q,t), \qquad F_2(q,P,t), \qquad F_3(p,Q,t), \qquad F_4(p,P,t)$$

(es sei darauf hingewiesen, dass $F(q,p)$ und $F(Q,P)$ keine Transformationen erzeugen).

Erzeugende und kanonische Transformationen

Für den ersten Fall erhalten wir

$$\sum_\alpha \left[p_\alpha \dot{q}_\alpha - P_\alpha \dot{Q}_\alpha\right] - [H - H'] = \frac{d}{dt} F_1(q,Q,t) \tag{6.26}$$

$$= \sum_\alpha \frac{\partial F_1}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha + \sum_\alpha \frac{\partial F_1}{\partial Q_\alpha} \dot{Q}_\alpha + \frac{\partial F_1}{\partial t}.$$

Diese Gleichung ist sicherlich erfüllt, falls

$$\boxed{p_\alpha = \frac{\partial F_1}{\partial q_\alpha}, \qquad P_\alpha = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_\alpha}, \qquad H' - H = \frac{\partial F_1}{\partial t}} \tag{6.27}$$

gilt (Koeffizientenvergleich). Aus (6.27) kann man also aus einer *beliebigen* Funktion $F_1(q,Q,t)$ eine gültige kanonische Transformation erhalten. Wenn nun $F_1(q,Q,t)$ gegeben ist, dann sind die Gl. (6.27) die Transformationsgleichungen der kanonischen Transformation in der Form $p_\alpha = p_\alpha(q,Q,t)$ und $P_\alpha = P_\alpha(q,Q,t)$. Diese muss man noch nach (q,p) auflösen und in $H(q,p,t)$ einsetzen, um die transformierte Hamiltonfunktion $H(Q,P,t)$ zu erhalten.

Für den Fall von $F_2(q,P,t)$ legt die Gleichung (6.27),

$$P_\alpha = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_\alpha},$$

nahe, die Darstellung

$$F_2(q,P,t) = F_1(q,Q,t) + \sum_\alpha P_\alpha Q_\alpha \tag{6.28}$$

zu wählen, wonach $F_2(q,P,t)$ die Legendre-Transformierte einer Funktion $F_1(q,Q,t)$ bezüglich den Variablen $P \leftrightarrow Q$ ist (beachte das umgekehrte Vorzeichen). Eine solche Darstellung ist immer möglich, man kann die Legendre-Transformation (6.28) ja auch umkehren. Wir lösen (6.28) nach F_1 auf und setzen in (6.26) ein. Wir erhalten

$$\sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha - [H - H'] = \sum_\alpha P_\alpha \dot{Q}_\alpha + \frac{d}{dt}\left[F_2(q,P,t) - \sum_\alpha Q_\alpha P_\alpha\right]$$
$$= -\sum_\alpha \dot{P}_\alpha Q_\alpha + \frac{d}{dt}F_2(q,P,t)$$
$$= -\sum_\alpha \dot{P}_\alpha Q_\alpha + \sum_\alpha \frac{\partial F_2}{\partial q_\alpha}\dot{q}_\alpha + \sum_\alpha \frac{\partial F_2}{\partial P_\alpha}\dot{P}_\alpha + \frac{\partial F_2}{\partial t}.$$

Ein Koeffizientenvergleich ergibt nun die Transformationsgleichungen

$$\boxed{p_\alpha = \frac{\partial F_2}{\partial q_\alpha}, \qquad Q_\alpha = \frac{\partial F_2}{\partial P_\alpha}, \qquad H' - H = \frac{\partial F_2}{\partial t}.} \tag{6.29}$$

Die kanonische Transformation lautet also $p_\alpha = p_\alpha(q,P,t)$ und $Q_\alpha = Q_\alpha(q,P,t)$.

Analog kann man die aus $F_3(p,Q,t)$ und $F_4(p,P,t)$ resultierenden Transformationsgleichungen herleiten. Sie lauten

$$\boxed{q_\alpha = -\frac{\partial F_3}{\partial p_\alpha}, \qquad P_\alpha = \frac{\partial F_3}{\partial Q_\alpha}, \qquad H' - H = \frac{\partial F_3}{\partial t}} \tag{6.30}$$

und

$$\boxed{q_\alpha = -\frac{\partial F_4}{\partial p_\alpha}, \qquad Q_\alpha = \frac{\partial F_4}{\partial P_\alpha}, \qquad H' - H = \frac{\partial F_4}{\partial t}.} \tag{6.31}$$

Mit einer der obigen Funktionen F_1 bis F_4 ist die Transformation von $H(q,p,t)$ nach $H(Q,P,t)$ kanonisch, und man erhält die neue Hamiltonfunktion $H(Q,P,t)$, indem man die jeweiligen nach q und p aufgelösten Transformationsgleichungen $q_\alpha = q_\alpha(Q,P,t)$ und $p_\alpha = p_\alpha(Q,P,t)$ in $H(q,p,t)$ einsetzt.

Anwendungsbeispiel: Pendel

Die Hamilton-Funktion für den harmonischen Oszillator (Pendel) hat die Form

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}q^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}q^2, \tag{6.32}$$

wobei wir die Definition $\omega^2 = k/m$ verwendet haben. Wir betrachten nun die Erzeugende

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

Die Transformationsgleichungen (6.27) werden dann zu

$$p = \frac{\partial F_1}{\partial q} = m\omega q \cot Q, \qquad P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} = \frac{m\omega q^2}{2\sin^2 Q}.$$

Um die Transformation wirklich durchführen zu können, müssen wir diese Gleichungen nach (q,p) auflösen, d.h.

$$q = \sqrt{\frac{2P}{m\omega}}\,\sin Q, \qquad p = \sqrt{2m\omega P}\,\cos Q. \tag{6.33}$$

Diese Ausdrücke für q und p setzen wir nun in die Hamilton-Funktion (6.32) ein und erhalten in den neuen Koordinaten

$$H(Q,P) = \omega P \cos^2 Q + \omega P \sin^2 Q = \omega P. \tag{6.34}$$

Die Hamiltonfunktion ist also zyklisch in Q (von Q unabhängig) und der kanonisch konjugierte Impuls nach

$$\dot{P} = -\frac{\partial H}{\partial Q} = 0$$

eine Konstante, und zwar im wesentlichen die Energie, $P = E/\omega$. Die zweite Bewegungsgleichung lautet

$$\dot{Q} = \frac{\partial H}{\partial P} = \omega, \qquad Q(t) = \omega t + Q_0.$$

Wir können nun die so gewonnene Lösung für $P = E/\omega$ und $Q(t)$ in die Transformationsgleichungen (6.33) einsetzen und erhalten für die ursprünglichen Koordinaten die bekannte Lösung

$$q(t) = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\,\sin(\omega t + Q_0), \qquad p(t) = \sqrt{2mE}\,\cos(\omega t + Q_0)$$

für den harmonischen Oszillator.

6.7 Hamilton-Jacobi Gleichung

Im letzten Beispiel haben wir gesehen, wie nützlich es ist, wenn man so verallgemeinerte Koordinaten und Impulse definiert, dass die Hamilton-Funktion dann proportional zu einem der Impulse wird. Die kanonischen Gleichungen sind dann trivial lösbar. Anders ausgedrückt ist die Lösung des mechanischen Systems dann gefunden, wenn es gelingt eine solche Tranformation zu gewinnen. Wir wollen diese Vorgangsweise nun etwas systematischer für autonome Systeme betrachten.

Der zeitunabhängige Fall

Wir möchten eine Erzeugende S finden, so dass nach der kanonischen Transformation die Hamilton-Funktion die Form

$$H(Q,P) = P_f \;\equiv\; E \tag{6.35}$$

hat, wobei E die erhaltene Energie E ist. Ferner wäre es schön, falls S von der Energie explizit abhinge. Dann sind nämlich die Bewegungsgleichungen in den neuen Koordinaten

$$\begin{aligned}
&\dot{P}_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial Q_\alpha} = 0 \qquad \alpha = 1,\dots,f \\
&\dot{Q}_\alpha = \frac{\partial H}{\partial P_\alpha} = 0 \qquad \alpha = 1,\dots,(f-1) \qquad\qquad \dot{Q}_f = \frac{\partial H}{\partial P_f} = 1
\end{aligned}$$

trivial lösbar:

$$\begin{aligned}
P_\alpha(t) &= P_\alpha(0) \qquad \alpha = 1,\dots,f \\
Q_\alpha(t) &= Q_\alpha(0) \qquad \alpha = 1,\dots,(f-1) \\
Q_f(t) &= Q_\alpha(0) + t
\end{aligned}$$

Diese Eigenschaften der transformierten Hamiltonfunktion lassen sich erreichen, wenn S die gemischte Form

$$S(q_1\dots q_{f-1}, q_f; Q_1\dots Q_{f-1}, P_f) = S(q_1\dots q_f; Q_1\dots Q_{f-1}, E)$$

hat. In den ersten $f-1$ verallgemeinerten Koordinaten ist S vom Typus F_1, in der $f-ten$ Koordinate vom Typus F_2. Es gilt also nach (6.27)

$$p_\alpha = \frac{\partial S}{\partial q_\alpha}, \qquad P_\alpha = -\frac{\partial S}{\partial Q_\alpha}, \qquad (f = 1\dots(f-1)) \tag{6.36}$$

und nach (6.29)

$$p_f = \frac{\partial S}{\partial q_f}, \qquad Q_f = \frac{\partial S}{\partial P_f} = \frac{\partial S}{\partial E}. \tag{6.37}$$

Wir setzen nun die obigen Ausdrücke für p_α in den Hamilton-Operator ein und erhalten

$$H(q_1\dots q_f, p_1\dots p_f) = \boxed{H(q_1\dots q_f, \frac{\partial S}{\partial q_1}\dots\frac{\partial S}{\partial q_f}) = E} \tag{6.38}$$

die *zeitunabhängige Hamilton-Jacobi-Gleichung*, eine Differentialgleichung für die Erzeugende $S(q,\dots)$ bezüglich der Variablen $q_1\dots q_f$. Um die Bedeutung der Variablen Q_α $(\alpha = 1,\dots(f-1))$ in S festzulegen, die in (6.38) nicht explizit vorkommen, betrachten wir zunächst die Bewegungsgleichungen und verwenden (6.35):

$$\begin{aligned}
\dot{P}_\alpha &= -\frac{\partial H(Q,P)}{\partial Q_\alpha} = 0, \qquad P_\alpha \equiv a_\alpha, \qquad (\alpha = 1\dots f) \\
\dot{Q}_\alpha &= \frac{\partial H(Q,P)}{\partial P_\alpha} = 0, \qquad Q_\alpha \equiv b_\alpha, \qquad (\alpha = 1\dots(f-1)) \\
\dot{Q}_f &= \frac{\partial H(Q,P)}{\partial P_f} = \frac{\partial H(Q,P)}{\partial E} = 1, \qquad Q_f \equiv t + b_f,
\end{aligned}$$

wobei wir die Integrationskonstanten $a = a_1\dots a_f$ und $b = b_1\dots b_f$ eingeführt haben. Nun folgt aus (6.36)

$$\frac{\partial S}{\partial Q_\alpha} = -P_\alpha, \qquad \frac{\partial S}{\partial b_\alpha} = -a_\alpha, \qquad (\alpha = 1\dots(f-1)).$$

Für $\alpha = f$ erhalten wir mit (6.37)

$$\frac{\partial S}{\partial P_f} = Q_f, \qquad \frac{\partial S}{\partial E} = t + b_f\,.$$

Die letzte Gleichung bestimmt den zeitlichen Durchlauf der Lösung.

Der zeitabhängige Fall

Für ein nichtautonomes System hängt die Hamiltonfunktion $H(q,p,t)$ explizit von der Zeit ab. Wir suchen jetzt eine zeitabhängige kanonische Transformation, sodass in den neuen Koordinaten die Hamiltonfunktion verschwindet:

$$K(Q,P,t) = 0$$

Dann sind alle Koordinaten $Q_1,\dots,Q_f$ und Impulse $P_1,\dots,P_f$ konstant. Wir wollen also die Bewegung auf Ruhe transformieren. Die erzeugende Funktion

$S(q, P, t)$ erhalten wir in diesem Fall als Lösung der *zeitabhängigen Hamilton-Jacobi-Gleichung*

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t) = 0 \qquad \text{mit} \qquad \det\left(\frac{\partial^2 S}{\partial q_\alpha \partial P_\alpha}\right) \neq 0 \tag{6.39}$$

Die Bewegung in den ursprünglichen Koordinaten ergibt sich aus den f Gleichungen

$$\frac{\partial S(q, P, t)}{\partial P_\alpha} = Q_\alpha \qquad q_\alpha = q_\alpha(Q, P, t)$$

Einsetzen in

$$p_\alpha = \frac{\partial S(q, P, t)}{\partial q_\alpha}$$

liefert dann $p_\alpha = p_\alpha(Q, P, t)$.

6.8 Satz von Liouville

Die Jacobi-Matrix $A_{kl} = \partial y_k / \partial x_l$ erhält das Phasenraumvolumen, denn nach (6.17) ist $|\det A| = 1$. Wegen der Äquivalenz (6.23) erhalten auch alle kanonische Flüsse das Phasenraumvolumen

$$\int_\Omega dx_1 \ldots dx_{2f} \ ,$$

also insbesondere auch der Propagator $\phi^t(x)$ der Bewegungsgleichungen. Dies ist der *Satz von Liouville*. Also stellt der Fluss der physikalischen Bewegungen im Phasenraum eine inkompressible Flüssigkeit dar.

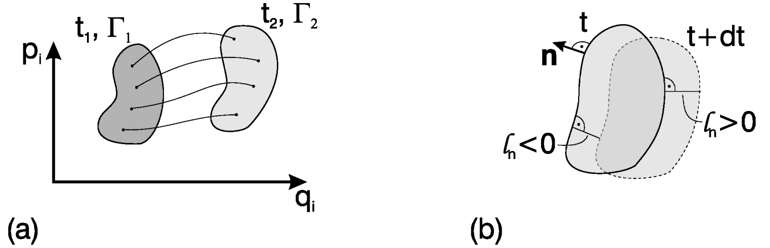

Abbildung 6.2: Illustration des Satzes von Liouville. Das Phasenraumvolumen Γ bleibt erhalten, sowohl infinitesimal wie auch nach endlichen Zeiten.

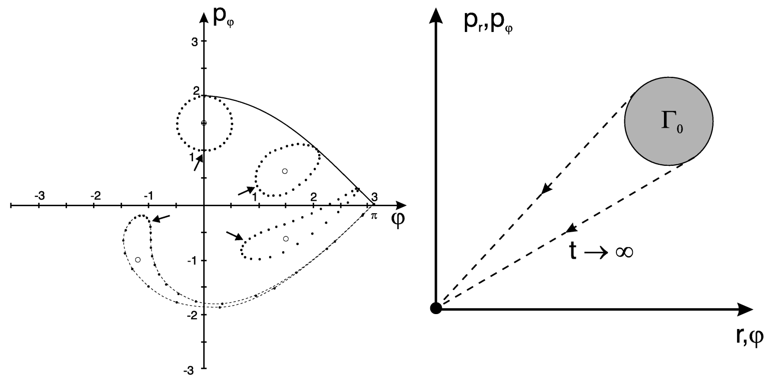

Abbildung 6.3: Links: Der Satz von Liouville für das mathematische Pendel. Ein Punkt befindet sich auf der Kriechbahn in den oberen instabilen Fixpunkt. Rechts: Mit Dissipation (gedämpftes Pendel) kontraktiert das Phasenraumvolumen dagegen.

6.9 Satz von Poincaré

Sei G im Phasenraum R^{2f} ein Gebiet mit endlichem Volumen V und $\phi^t(x)$ ein volumenerhaltender Fluss in G. In anderen Worten, die physikalischen Bahnen sind beschränkt. Für jede Teilmenge K von G mit endlichem Volumen gibt es dann beliebig große Zeiten t, so dass

$$\phi^t(K) \cap K \neq \emptyset, \tag{6.40}$$

wobei $\emptyset$ die leere Menge darstellt. Dies ist der *Satz von Poincaré*.

Zum Beweis nehmen wir das Gegenteil an und zeigen einen Widerspruch auf. Falls $\phi^t(K) \cap K = \emptyset$ für alle $t > T$ und einem $T < \infty$, so ist auch

$$\phi^{nT}(K) \cap K = \emptyset, \qquad (n = 1, 2, 3 \ldots).$$

Nach dem Satz von Liouville ist das Phasenraumvolumen erhalten, zwei disjunkte Teilmengen von G müssen nach Propagation durch ϕ^t somit auch disjunkt bleiben, also insbesondere für $t = mT$

$$\phi^{(n+m)T}(K) \cap \phi^m(K) = \emptyset, \qquad (n, m = 1, 2, 3 \ldots).$$

Die Teilmengen

$$\phi^T(K), \ \phi^{2T}(K), \ \phi^{3T}(K), \ \ldots$$

sind also alle disjunkt, haben aber alle das gleiche Volumen. Ein Widerspruch zur Voraussetzung $V < \infty$.

Ergodische Bewegung

Man kann den Satz von Poincaré wie folgt verallgemeinern: Für alle Teilmengen K' und K von G gibt es genügend große Zeiten t so dass

$$\phi^t(K') \cap K \neq \emptyset. \qquad (6.41)$$

Hier für muss das Volumen von K endlich sein, nicht aber das von K'. Insbesondere kann K' auch nur aus einem einzigen Punkt x bestehen, dann heißt x *Wiederkehrpunkt* bezüglich K.

Der Satz von Poincaré in der allgemeineren Form (6.41) besagt, dass jedes beliebige Teilvolumen K des Phasenraumes G in hinreichend großen Zeiten t vom physikalischen Fluss besucht wird, wobei das Teilvolumen K' die Menge der Anfangsbedingungen darstellt. Man sagt auch, die Bewegung sei 'ergodisch'.

Beispiel: Kugeln im Kasten

Zur Illustration betrachten wir N elastische Kugeln (Edelgasatome) in einem endlichen Gebiet Ω des R^3 mit elastisch reflektierenden Wänden. Dann ist die kinetische Energie

$$T = \sum_i^N \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m_i}$$

erhalten und somit das Gebiet des Phasenraums

$$G \ : \quad \vec{x}_i \in \Omega, \qquad \sum_i \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m_i} < E$$

invariant unter ϕ^t. Denn offensichtlich ist $\phi^t(G) \subset G$, was zusammen mit dem Satz von Liouville $\phi^t(G) = G$ bedeutet. Da G im R^{6N} ein endliches Volumen hat, ist der Satz von Poincaré anwendbar.

Wiederkehrzeiten

Alle Anfangsbedingungen $\vec{x}_i(0)$ und $\vec{p}_i(0)$ (bis auf Ausnahmen mit Maß Null) führen also zu einer Bewegung, die nach genügend langer Zeit wieder beliebig nahe an den ursprünglichen Zustand zurückführt. Dies widerspricht unserem physikalischen Verständnis. Zu Recht, denn diese *Wiederkehrzeiten* sind exponentiell groß, das heißt wesentlich größer als das Alter des Universums. Für physikalisch relevante Zeiten ist das Verhalten eines komplexen mechanischen Systems jedoch sehr kompliziert und kann im allgemeinen sogenanntes *chaotisches Verhalten* zeigen.

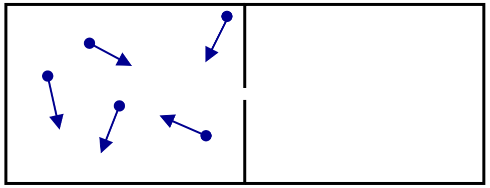

Abbildung 6.4: Illustration des Wiederkehr-Satzes von Poincaré. Nach genügend langer Zeit sind alle Atome wieder rechts in der gleichen Ausgangslage mit den gleichen Geschwindigkeiten.