§7. Hamiltonische Systeme

7.1 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

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = 0, \qquad (\alpha = 1 \dots f) \tag{7.1}$$

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

$$p_\alpha = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \tag{7.2}$$

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. Zu diesem Zweck definiert man eine "Hamilton-Funktion" $H(q, p, t)$, welche aus der Lagrange-Funktion $L(q, \dot{q}, t)$ durch eine "Berührungstransformation" (auch Legendre-Transformation genannt) hervorgeht.

Kanonische Gleichungen

Hierzu löst man (7.2) nach $\dot{q}$ auf und setzt das so gefundene $\dot{q}_\alpha = \dot{q}_\alpha(q, p, t)$ in

$$H(q, p, t) \;=\; \sum_\alpha p_\alpha\, \dot{q}_\alpha \;-\; L(q, \dot{q}, t) \tag{7.3}$$

ein. Wir bemerken, dass für autonome Systeme (zeitunabhängig) nach §4.7 die Hamilton-Funktion (7.3) gerade die erhaltene Gesamtenergie darstellt. Die Legendre-Transformation lässt sich auch graphisch deuten:

Das Differential der Hamilton-Funktion ist bei festen Zeiten t

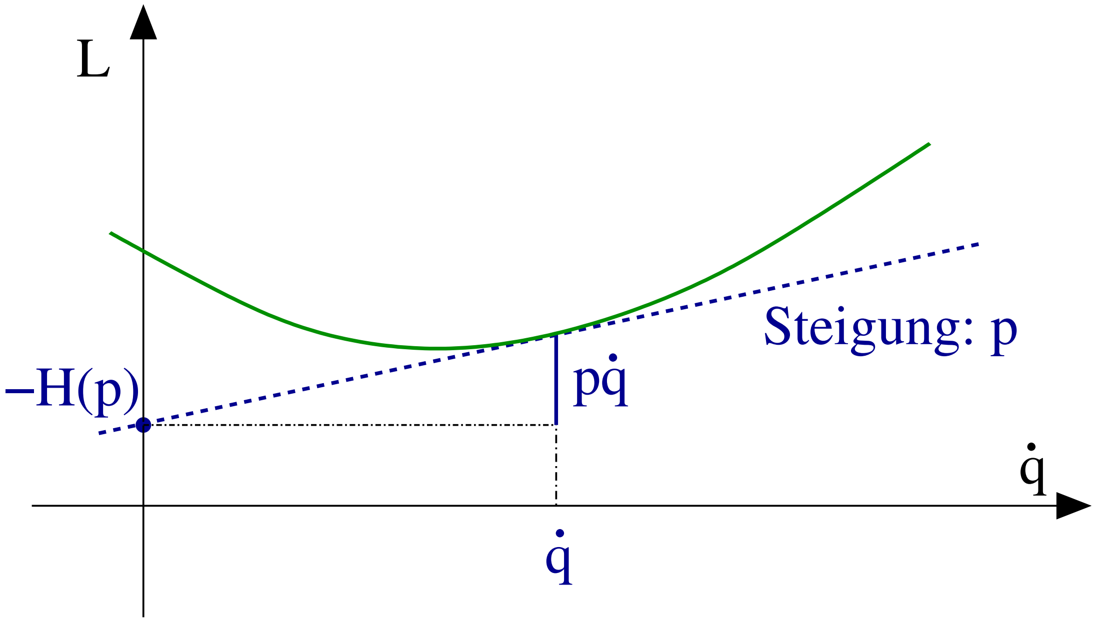


Abbildung 7.1: Graphische Interpretation der Legendre-Transformation $H(q,p,t) = p\dot{q} - L(q,\dot{q},t)$. Ziehen wir für festes q $p\dot{q}$ von $L(q,\dot{q},t$ ab so erhalten wir $-H(q,p,t)$.

$$
\begin{aligned}
dH &= \sum_\alpha \left[p_\alpha d\dot{q}_\alpha + \dot{q}_\alpha dp_\alpha - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} dq_\alpha - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} d\dot{q}_\alpha\right] \\
&= \sum_\alpha \left[p_\alpha d\dot{q}_\alpha + \dot{q}_\alpha dp_\alpha - \dot{p}_\alpha dq_\alpha - p_\alpha d\dot{q}_\alpha\right]
\end{aligned}
$$

$$
= \sum_\alpha \left[\underbrace{\dot{q}_\alpha}_{\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}} dp_\alpha - \underbrace{\dot{p}_\alpha}_{\frac{-\partial H}{\partial q_\alpha}} dq_\alpha\right] = \sum_\alpha \left[\frac{\partial H}{\partial q_\alpha} dq_\alpha + \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} dp_\alpha\right],
$$

für alle dq und dp. Also erhalten wir die
“kanonischen Gleichungen”

$$
\boxed{\dot{q}_\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}, \qquad \dot{p}_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}} \qquad (\alpha = 1 \dots f). \tag{7.4}
$$

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

$$
x = (x_1 \dots x_{2f}) \equiv (q_1\, p_1, q_2\, p_2, \dots, \dots q_f\, p_f) \tag{7.5}
$$

im "Phasenraum" mit $x_{2j-1} = q_j$ und $x_{2j} = p_j$ $(j = 1, \dots f)$. Wir bemerken, dass die f Lagrange-Gleichungen (7.1) 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 §3 durchgeführt.

Beispiel: Teilchen im Potential

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

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

Beispiel: Teilchen im elektromagnetischem Feld

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

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

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

also

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

7.2 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, welche die kanonischen Gleichungen (7.4) invariant lassen. Eine Motivation, eine solche "kanonische Transformation" durchzuführen, ist die Aussicht, dass nach der Transformation die Bewegungsgleichungen besonders einfach sind.

Antisymmetirscher Tensor

Wir führen den antisymmetrischen Tensor

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

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

$$\boxed{\sum_{k=1}^{2f} \varepsilon_{ik}\,\dot{x}_k \; = \; \frac{\partial H(x)}{\partial x_i}} \qquad (i = 1\dots 2f) \tag{7.6}$$

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 $i = 2$

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

Jacobi-Matrizen

Die Invarianz der kanonischen Gleichungen ist also mit

$$\sum_{k=1}^{2f} \varepsilon_{ik}\,\frac{dy_k}{dt} \; = \; \frac{\partial H}{\partial y_i}, \qquad (i = 1\dots 2f) \tag{7.7}$$

gleichbedeutend. Um festzustellen für welche $y = y(x)$ (7.7) erfüllt ist, müssen wir (7.7) 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

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

Diese Gleichung muß für alle l gelten. Wir definieren die Jacobi-Matrix[1]

$$A_{kl} = \frac{\partial y_k}{\partial x_l}, \qquad \left(A^{-1}\right)_{ki} = \frac{\partial x_k}{\partial y_i}, \tag{7.8}$$

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"[2] A die Bedingung

$$\boxed{A^T \varepsilon A = \varepsilon} \tag{7.9}$$

Die symplektischen Matrizen A bilden eine Gruppe und aus (7.9) folgt

$$|\det A| = 1, \tag{7.10}$$

[1]Die Jacobi Matrix ist die Matrix aller erster partiellen Ableitungen.
[2]Symplektische Matrizen sind solche welche eine antisymmetrische Bilinearform invariant lassen.

es gilt sogar $\det A = +1$, was wir hier nicht beweisen. Eine Koordinatentransformation $(x_1 \ldots x_{2f}) \mapsto (y_1 \ldots y_{2f})$ heißt kanonisch, falls ihre Jacobi Matrix (7.8) symplektisch ist.

Beispiel: Transformation der Lagekoordinaten

Beliebige Transformationen

$$(q_1 \ldots q_f) \;\mapsto\; (Q_1 \ldots Q_f), \tag{7.11}$$

der Lagekoordinaten sind bei entsprechender Transformation der Impulse

$$(p_1 \ldots p_f) \;\mapsto\; (P_1 \ldots P_f), \tag{7.12}$$

kanonische Transformationen, denn die Lagrange-Gleichungen sind invariant unter beliebigen Transformationen der Art (7.11), und somit nach der Legendre-Transformation (7.3) auch die kanonischen Gleichungen (7.4). Die Transformation (7.12) der Impulse ist dabei durch

$$P_\alpha \;=\; \frac{\partial}{\partial \dot{Q}_\alpha} L(Q, \dot{Q}) \;=\; \sum_\beta \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\beta}}_{p_\beta} \underbrace{\frac{\partial \dot{q}_\beta}{\partial \dot{Q}_\alpha}}_{\frac{\partial q_\beta}{\partial Q_\alpha}} + \sum_\beta \frac{\partial L}{\partial q_\beta} \underbrace{\frac{\partial q_\beta}{\partial \dot{Q}_\alpha}}_{=0} \;=\; \sum_\beta p_\beta \frac{\partial q_\beta}{\partial Q_\alpha}, \tag{7.13}$$

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 (7.11), insbesondere können auch Lagekoordinaten und Impulse vermischt werden. Dies ist ein Vorzug der Hamiltonischen Formulierung.

7.3 Kanonische Flüsse

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

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

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

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

Umgekehrt definiert ein Vektorfeld $v(y)$ via

$$\frac{dy_i}{d\lambda} \;=\; v_i(y), \qquad\qquad (i = 1 \ldots 2f) \tag{7.14}$$

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 (7.14) "kanonische Flüsse" erzeugen, also solche Flüsse, für welche 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 (7.9) erfüllt. Nach (7.14) 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

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

in Matrixnotation. Um die Bedingung für $v(y, \lambda)$ zu finden, für welche 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 (7.9)

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

für alle λ erfüllt ist, genügt es also, dass

$$0 \;=\; \frac{d}{d\lambda}\Big(A^T \varepsilon A\Big) \;=\; (VA)^T \varepsilon A \,+\, A^T \varepsilon V A$$
$$=\; A^T V^T \varepsilon A \,+\, A^T \varepsilon V A \;=\; A^T \Big(V^T \varepsilon \,+\, \varepsilon V\Big)\, A$$

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

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

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

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

$g(y)$ der Gradient einer Funktion $F(y)$ ist, also

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

gilt, oder

$$\boxed{\sum_{k=1}^{2f} \varepsilon_{ik} \frac{dy_k}{d\lambda} \;=\; \frac{\partial F(y)}{\partial y_i}} \qquad\qquad (i = 1 \ldots 2f). \qquad\qquad (7.15)$$

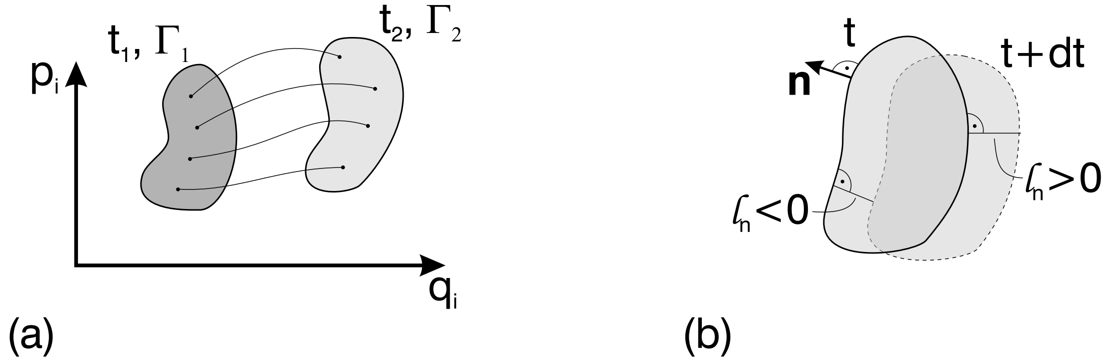


Abbildung 7.2: Illustration des Satzes von Liouville. Das Phasenraumvolumen Γ bleibt erhalten, sowohl infinitesimal wie auch nach endlichen Zeiten.

Man kann die obige Schlussweise auch umkehren und folgern, dass $y(x,\lambda)$ dann und genau dann ein kanonischer Fluss ist, falls eine Funktion $F(y)$ auf dem Phasenraum existiert, so dass (7.15) erfüllt ist. Nun sind aber (7.15) mit den Hamiltonischen Bewegungsgleichungen (7.6) nach der Vertauschung

$$x \longleftrightarrow y, \qquad t \longleftrightarrow \lambda, \qquad H(x) \longleftrightarrow F(y) \tag{7.16}$$

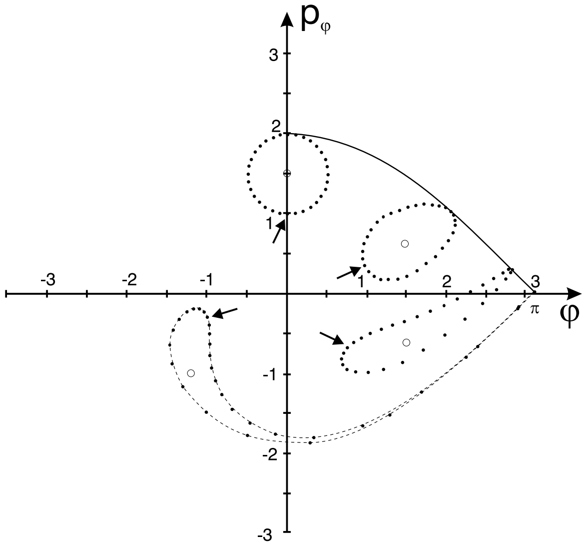
vollkommen äquivalent; *"Die Differentialgleichungen kanonischer Flüsse sind also die kanonischen Gleichungen"*.

7.4 Satz von Liouville

Ein spezieller kanonischer Fluß ist die Bewegungsabbildung $\phi^t(x)$ eines autonomen Hamiltonischen Systems, also der Propagator der Hamiltonischen Bewegungsgleichungen (7.6).
Die Jacobi-Matrix $A_{kl} = \partial y_k / \partial x_l$ erhält das Phasenraumvolumen, denn nach (7.10) ist $|\det A| = 1$. Wegen der Äquivalenz (7.16) 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.



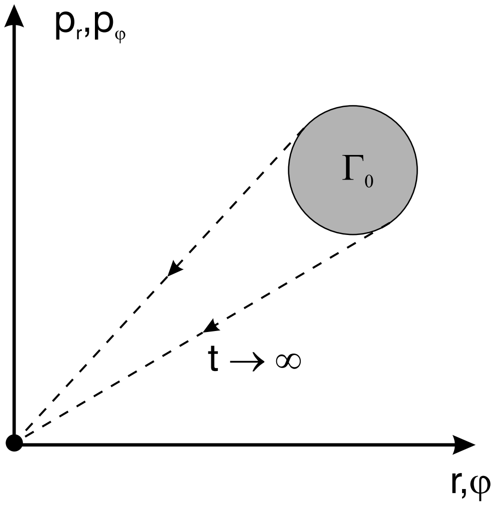


Abbildung 7.3: Links: Der Satz von Liouville für das mathematische Pendel. Ein Punkt befindet sich auf der Kriechbahn in den oberen instabilen Fixpunkt. Rechts: Mit Dissipation (gedämpftes Pendel) kontraktiert das Phasenraumvolumen dagegen.

7.5 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

$$\phi^t(K) \cap K \neq \emptyset, \tag{7.17}$$

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

$$\phi^t(K') \cap K \neq \emptyset. \tag{7.18}$$

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 (7.18) 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.

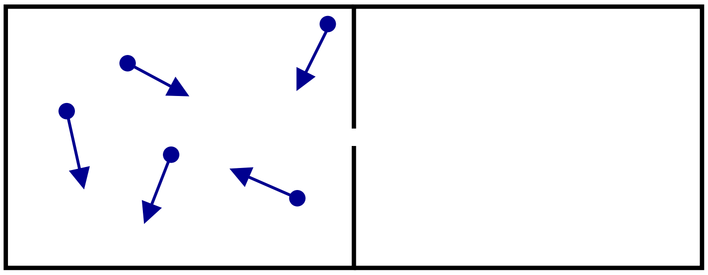


Abbildung 7.4: Illustration des Wiederkehr-Satzes von Poincaré. Nach genügend langer Zeit sind alle Atome wieder rechts in der gleichen Ausgangslage mit den gleichen Geschwindigkeiten.

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.

7.6 Poisson-Klammern

Seien $\varphi(x)$ und $\psi(x)$ zwei Funktionen auf dem Phasenraum $x = (q_1 p_1 \dots q_f p_f)$, dann ist die "Poisson-Klammer" $\{\varphi, \psi\}$ via

$$\{\varphi, \psi\} = \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial q_i} \frac{\partial \psi}{\partial p_i} - \frac{\partial \varphi}{\partial p_i} \frac{\partial \psi}{\partial q_i} \right) \tag{7.19}$$

definiert.

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 (7.4) verwendet haben. Also ist

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, H\}. \tag{7.20}$$

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

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

Setzt man die Koordinate q_j anstelle von A in (7.20) ein, so erhält man

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

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

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

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

Rechenregeln

Folgende Rechenregeln gelten für die Poissonklammern:

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

und (Übung) die "Jacobi-Identität"

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

7.7 Quantenmechanik

An dieser Stelle ein kleiner Ausblick auf die Quantenmechanik, welche 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 §7.3). Eine weite 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, welche im “klassischen Grenzfall” (Plancksches Wirkungsquantum $\hbar \to 0$) die gegebenen klassischen Gleichungen reproduziert. Dieses Problem ist ganz dem analog, welches wir in §6 hatten (diejenige Lorentz-invariante Gleichung zu finden, welche den Grenzfall $v/c \to 0$ richtig reproduziert).
Ganz allgemein betrachtet man in der Quantenmechanik nicht den Phasenraum, sondern den Hilbertraum, welcher der Raum aller Funktionen $f(q_1 \ldots q_f)$ ist. Weiter werden generell alle Funktionen auf dem Phasenraum zu Operatoren auf dem Hilbertraum (Operatoren sind in geeigneter Basis Matrizen).

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.	$A(q_i, p_i)$	Operator $\hat{A}$
4.	Hamiltonfunktion H	Hamiltonoperator $\hat{H}$
5.	q_i, p_i	Operatoren $\hat{q}_i$, $\hat{p}_i$
6.	$\{A, B\}$	Kommutator $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$
7.	$\{q_i, p_j\} = 0$	$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$
8.	$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, H\}$	$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{A} = i\hbar\frac{\partial\hat{A}}{\partial t} + [\hat{A}, \hat{H}]$

Diese Tabelle beschreibt das sogenannte “Korrespondenzprinzip”. Insbesondere sieht man aus Punkt 7. und 8., dass der klassische Grenzfall $\hbar \to 0$ erfüllt ist.

7.8 Erzeugende für kanonische Transformationen

Es gibt Rechenvorschriften, welche 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 (7.3) 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

$$(q_1 p_1, \dots q_f, p_f) \longmapsto \quad (Q_1 P_1, \dots Q_f, P_f); \tag{7.21}$$

und

$$H(p,q,t) \;\longmapsto\; H'(P,Q,t) \tag{7.22}$$

erhalten bleiben, falls die Variationen

$$\begin{aligned} &\delta \int dt \Big[\sum_\alpha p_\alpha \, \dot q_\alpha \;-\; H(q,p,t)\Big] \\ =\; &\delta \int dt \Big[\sum_\alpha P_\alpha \, \dot Q_\alpha \;-\; H'(Q,P,t)\Big] \;=\; 0 \end{aligned}$$

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

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

wobei $F(q,p,Q,P,t)$ eine beliebige Funktion sein kann, die aber wegen (7.21) nur von zwei der vier Variablensätze q,p,Q,P abhängt. Es gibt vier Möglichkeiten, welche man in der Form

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

schreibt (bemerke, daß $F(q,p)$ und $F(Q,P)$ keine Transformationen erzeugen).

Erzeugende und kanonische Transformationen

Für den ersten Fall erhalten wir

$$\begin{aligned} \sum_\alpha \Big[p_\alpha \, \dot q_\alpha - P_\alpha \, \dot Q_\alpha\Big] - [H - H'] &= \frac{d}{dt} F_1(q,Q,t) \\ &= \sum_\alpha \frac{\partial F_1}{\partial q_\alpha} \dot q_\alpha + \sum_\alpha \frac{\partial F_1}{\partial Q_\alpha} \dot Q_\alpha + \frac{\partial F_1}{\partial t}. \end{aligned} \tag{7.23}$$

Diese Gleichung ist sicherlich erfüllt, falls

$$\boxed{p_\alpha = \frac{\partial F_1}{\partial q_\alpha}, \qquad P_\alpha = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_\alpha}, \qquad H' - H = \frac{\partial F_1}{\partial t}} \tag{7.24}$$

gilt (Koeffizientenvergleich). Aus (7.24) kann man also aus einer *beliebigen* Funktion $F_1(q, Q, t)$ eine gültige kanonische Transformation erhalten.
Für den Fall von $F_2(q, P, t)$ legt die Gleichung (7.24),

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

nahe, die Darstellung

$$F_2(q, P, t) = F_1(q, Q, t) + \sum_\alpha P_\alpha Q_\alpha \tag{7.25}$$

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 (7.25) ja auch umkehren. Wir lösen (7.25) nach F_1 auf und setzen in (7.23) ein. Wir erhalten

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

Ein Koeffizientenvergleich ergibt nun die Transformationsgleichungen

$$\boxed{p_\alpha = \frac{\partial F_2}{\partial q_\alpha}, \qquad Q_\alpha = \frac{\partial F_2}{\partial P_\alpha}, \qquad H' - H = \frac{\partial F_2}{\partial t}.} \tag{7.26}$$

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

$$\boxed{q_\alpha = -\frac{\partial F_3}{\partial p_\alpha}, \qquad P_\alpha = \frac{\partial F_3}{\partial Q_\alpha}, \qquad H' - H = \frac{\partial F_3}{\partial t}} \tag{7.27}$$

und

$$\boxed{q_\alpha = -\frac{\partial F_4}{\partial p_\alpha}, \qquad Q_\alpha = \frac{\partial F_4}{\partial P_\alpha}, \qquad H' - H = \frac{\partial F_4}{\partial t}.} \tag{7.28}$$

Anwendungsbeispiel: Pendel

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

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}q^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}q^2, \tag{7.29}$$

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 (7.24) 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.

$$q = \sqrt{\frac{2P}{m\omega}}\sin Q, \qquad p = \sqrt{2m\omega P}\cos Q. \tag{7.30}$$

Diese Ausdrücke für q und p setzen wir nun in die Hamilton-Funktion (7.29) ein und erhalten in den neuen Koordinaten

$$H(Q,P) \;=\; \omega P \,\cos^2 Q + \omega P \,\sin^2 Q \;=\; \omega P. \tag{7.31}$$

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

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

Wir können nun die so gewonnene Lösung für $P = E/\omega$ und $Q(t)$ in die Transformationsgleichungen (7.30) einsetzen und erhalten für die ursprünglichen Koordinaten die bekannte Lösung

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

für den harmonischen Oszillator.

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

$$H(Q,P) \;=\; P_f \;\equiv\; E \tag{7.32}$$

hat, wobei E die erhaltene Energie E ist. Ferner wäre es schön, falls S von der Energie explizit abhänge. Dies läßt sich erreichen, wenn S die gemischte Form

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

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 (7.24)

$$p_\alpha \;=\; \frac{\partial S}{\partial q_\alpha}, \qquad\qquad P_\alpha \;=\; -\frac{\partial S}{\partial Q_\alpha}, \qquad\qquad (f = 1 \ldots (f-1)) \tag{7.33}$$

und nach (7.26)

$$p_f \;=\; \frac{\partial S}{\partial q_f}, \qquad\qquad Q_f \;=\; \frac{\partial S}{\partial P_f} \;=\; \frac{\partial S}{\partial E}. \tag{7.34}$$

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

$$H(q_1 \ldots q_f, p_1 \ldots p_f) \;=\; \boxed{\;H(q_1 \ldots q_f, \frac{\partial S}{\partial q_1} \ldots \frac{\partial S}{\partial q_f}) \;=\; E\;} \tag{7.35}$$

die “Hamilton-Jacobi”-Gleichung, eine Differentialgleichung für die Erzeugende $S(q, \ldots)$ bezüglich der Variablen $q_1 \ldots q_f$. Um die Bedeutung der Variablen Q_α ($\alpha = 1, \ldots (f-1)$) in S festzulegen, welche in (7.35) nicht explizit vorkommen, betrachten wir zunächst die Bewegungsgleichungen und verwenden (7.32):

$$\dot{P}_\alpha = -\frac{\partial H(Q,P)}{\partial Q_\alpha} = 0, \qquad\qquad P_\alpha \equiv a_\alpha, \qquad\qquad (\alpha = 1 \ldots f)$$

$$\dot{Q}_\alpha = \frac{\partial H(Q,P)}{\partial P_\alpha} = 0, \qquad Q_\alpha \equiv b_\alpha, \qquad (\alpha = 1\ldots(f-1))$$

$$\dot{Q}_f = \frac{\partial H(Q,P)}{\partial P_f} = \frac{\partial H(Q,P)}{\partial E} = 1, \qquad Q_f \equiv t + b_f,$$

wobei wir die Integrationskonstanten $a = a_1 \ldots a_f$ und $b = b_1 \ldots b_f$ eingeführt haben. Nun folgt aus (7.33)

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

Für $\alpha = f$ erhalten wir mit (7.34)

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

welche den zeitlichen Durchlauf der Lösung bestimmt.