

Kapitel 8: Hamilton - Formalismus

Einordnung: Newton (Principia) - 17. Jh.
Euler, d'Alembert, Lagrange - 18. Jh.
Hamilton, Jacobi - 19. Jh. ←

Für konkrete Rechnungen ist der Lagrange-Formalismus ausreichend (meist einfacher als Hamilton-Formalismus).

Motivation für Hamilton-Theorie:

- hoch elegant \rightarrow abstrakte Einsichten
- besser für Störungstheorie (z.B. Himmelsmechanik)
- mehr Invarianzen \rightarrow Transformationstheorie
- Basis für Quantenmechanik (auch relativistisch)

Ausgangspunkt: das Jacobi-Integral $\mathcal{J}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{q}}} \dot{\vec{q}} - L$ (*)

und die verallgemeinerten Impulse $p_a(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_a}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t)$ (Δ)

spielen eine wichtige Rolle im Lagrange-Formalismus (z.B. als Erhaltungsgrößen oder für den Fall $\mathcal{J}_0 = E$).

Idee: Übergang $L \rightarrow \mathcal{J}$; $\dot{q}_a \rightarrow p_a$ hilfreich?

Dazu: (i) $\dot{\vec{q}} = \dot{\vec{q}}(\vec{q}, \vec{p}, t)$ aus Inversion von Δ
(ii) Einsetzen in *

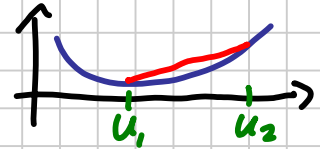
$\rightarrow H(\vec{q}, \vec{p}, t) = \mathcal{J}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}(\vec{q}, \vec{p}, t), t)$ Hamilton-Funktion

Transformationen wie die von $L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t)$ auf $H(\vec{q}, \vec{p}, t)$ werden als **Legendre-Transformationen** bezeichnet.

Weitere Anwendungen: z. B. thermodynamische Potentiale sowie Feldtheorien (für Kontinua von Freiheitsgraden).

8.1 Die Legendre-Transformation

Wir betrachten zunächst den (einfachsten) skalaren Fall: Sei die Funktion $F(u)$ der reellen Variable u in ihrem Definitionsbereich zweimal stetig differenzierbar und **strikt konvex**: $F''(u) > 0 \forall u$



($\leadsto F(\lambda u_1 + (1-\lambda)u_2) < \lambda F(u_1) + (1-\lambda)F(u_2)$ ($0 < \lambda < 1$)
allgemeineres Kriterium für strikte Konvexität (auch $F(u) = u^2$)

Definiere Hilfsfunktion $\tilde{G}(v, u) = vu - F(u)$
 \uparrow zunächst unabhängige Variable

$\tilde{G}(u, v)$ ist als Funktion von u strikt konkav:

$$\frac{\partial \tilde{G}}{\partial u} = v - \frac{\partial F}{\partial u}; \quad \frac{\partial^2 \tilde{G}}{\partial u^2} = - \frac{\partial^2 F}{\partial u^2} < 0$$

$\Rightarrow \tilde{G}(v, u)$ hat als Funktion von u keine lokalen Minima, also höchstens ein Maximum bei $u_m(v)$

mit
$$0 = \frac{\partial \tilde{G}}{\partial u}(v, u_m(v)) = v - F'(u_m(v))$$

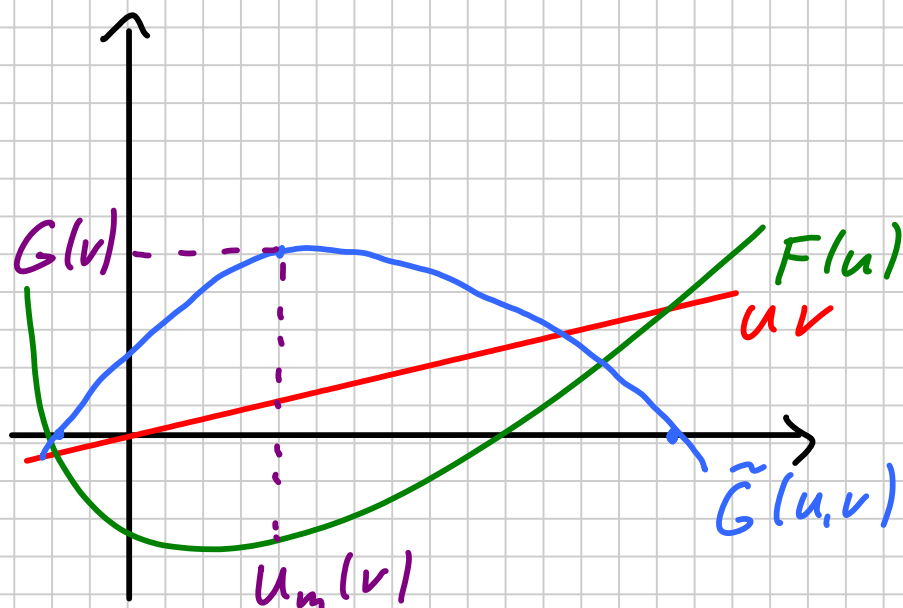
Betrachte im Folgenden nur v , für die $-\infty < u_m(v) < \infty$

$u_m(v)$ ist streng monoton ansteigend:

$$0 = 1 - \underbrace{F''(u_m(v))}_{> 0} u_m'(v) \Rightarrow u_m'(v) = [F''(u_m(v))]^{-1} > 0$$

Def: Die Legendre-Transformierte $G(v)$ von $F(u)$

wird definiert als $G(v) = \tilde{G}(v, u_m(v))$
 $= v u_m(v) - F(u_m(v))$



Die Legendre-Transformierte ist ebenfalls strikt

konvex: $G'(v) = u_m(v) + \underbrace{[v - F'(u_m(v))]}_{=0 \text{ n.v.}} u_m'(v)$
 $= u_m(v)$

$\Rightarrow G''(v) = u_m'(v) > 0$

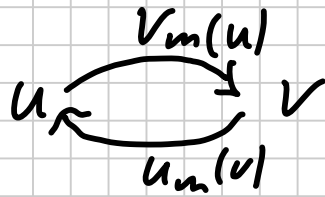
Behauptung: die Legendre-Transformierte von $G(v)$ ist wieder durch $F(u)$ gegeben, die beiden Funktionen sind also **dual**.

Beweis: betrachte $\tilde{F}(u, v) = uv - G(v)$
 $= uv - [v u_m(v) - F(u_m(v))]$

G strikt konvex $\rightarrow \tilde{F}$ strikt konkav als Fkt. von v
 \rightarrow eindeutiges Maximum bei $v_m(u)$ mit $v_m'(u) > 0$

$$\text{bestimmt durch } 0 = \frac{\partial \bar{F}}{\partial v}(u, v_m(u)) = u - \frac{\partial}{\partial v} G(v_m(u)) \\ = u - u_m(v_m(u))$$

Als Abbildungen sind u_m und v_m also invers:



Die Legendre-Transformierte von $G(v)$ lautet also:

$$F^*(u) = \bar{F}(u, v_m(u)) = v_m(u) \underbrace{[u - u_m(v_m(u))]}_{=0} + \underbrace{F(u_m(v_m(u)))}_{=u} \\ = F(u)$$

□

Für duale Funktionen $\bar{F}(u), G(v)$ gilt die

Young'sche Ungleichung: $vu \leq \bar{F}(u) + G(v)$

Beweis: $vu - F(u) = \bar{G}(v, u) \leq \bar{G}(v, u_m(v)) = G(v)$ □

Bemerkung: der Formalismus ließe sich problemlos auch auf konkave Funktionen übertragen. 2 Alternativen:

(i) direkt: konvex \leftrightarrow konkav, monoton steigend \rightarrow fallend, Maximum \rightarrow Minimum

(ii) über konvexe Hilfsfunktion (F konkav $\Leftrightarrow \bar{F} = -F$ konvex)
 $\bar{F}(u) = -F, \bar{G}(v) = -G(-v), \bar{v} = -v, \bar{u}_m(\bar{v}) = u_m(v)$

$$\leadsto G(v) = v u_m(v) - F(u_m(v)); \quad v = F'(u_m(v))$$

$$\Leftrightarrow \bar{G}(\bar{v}) = \bar{v} \bar{u}_m(\bar{v}) - \bar{F}(\bar{u}_m(\bar{v})); \quad \bar{v} = \bar{F}'(\bar{u}_m(\bar{v}))$$

Mit beiden Herleitungen erhält man identische Resultate

Beispiele:

$$a) F(u) = \frac{1}{2} u^2$$

$$\tilde{G}(v, u) = uv - \frac{1}{2} u^2$$

$$0 = \frac{\partial}{\partial u} \tilde{G}(v, u) \Big|_{u=u_m(v)} = v - u_m(v)$$

$$\Rightarrow G(v) = \tilde{G}(v, u_m(v)) = v^2 - \frac{1}{2} v^2 = \frac{1}{2} v^2$$

\Rightarrow Funktionen sind selbst-dual

Young: $uv \leq \frac{1}{2} u^2 + \frac{1}{2} v^2 \Leftrightarrow \frac{1}{2} (u-v)^2 \geq 0$ *Scharf!*

$$b) F(u) = \frac{1}{p} u^p; \quad u > 0, p \in \mathbb{R}, p > 1$$

$$\tilde{G}(v, u) = vu - \frac{1}{p} u^p$$

$$\frac{d}{du} \tilde{G}(v, u) = v - u^{p-1} \Rightarrow u_m(v) = v^{\frac{1}{p-1}}$$

definiere $q \in \mathbb{R}$ durch $q = \frac{p}{p-1} > 1$

$$(\Leftrightarrow \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1)$$

$$\Rightarrow G(v) = v u_m(v) - F(u_m(v))$$

$$= v^{1 + \frac{1}{p-1}} - \frac{1}{p} [v^{\frac{1}{p-1}}]^p$$

$$= v^q - \frac{1}{p} v^q = \frac{1}{q} v^q \quad (v > 0)$$

Young: $uv \leq \frac{1}{p} u^p + \frac{1}{q} v^q \quad (p, q > 1, \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1)$

Theorie II: Vorlesung 14

Notiztitel

02.12.2008

8.1.1 Funktionen mehrerer Variabler

Wir betrachten eine zweimal stetig differenzierbare Funktion $F(\vec{u}) = F(u_1, u_2, \dots, u_n)$, die streng konvex sein soll: $\vec{h}^T \frac{\partial^2 F}{\partial \vec{u}^2} \vec{h} > 0 \quad \forall \vec{h} \neq 0$ ↘ Matrix 2. Ableitungen pos. def.

und definieren die Hilfsfunktion $\tilde{G}(\vec{v}, \vec{u}) = \vec{v} \cdot \vec{u} - F(\vec{u})$.

Diese ist strikt konkav als Funktion von \vec{u} und hat daher höchstens ein Maximum bei $\vec{u}_m(\vec{v})$, das durch

$$\vec{0} = \frac{\partial \tilde{G}}{\partial \vec{u}}(\vec{v}, \vec{u}_m(\vec{v})) = \vec{v} - \frac{\partial F}{\partial \vec{u}}(\vec{u}_m(\vec{v})) \quad (\nabla)$$

gegeben ist.

Beachte: auch die Gradientenmatrix $\frac{\partial \vec{u}_m}{\partial \vec{v}}$ ist positiv

definit, da $\vec{0} = \mathbb{1} - \frac{\partial^2 F}{\partial \vec{u}^2}(\vec{u}_m(\vec{v})) \frac{\partial \vec{u}_m}{\partial \vec{v}}(\vec{v})$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial \vec{u}_m}{\partial \vec{v}}(\vec{v}) = \left[\frac{\partial^2 F}{\partial \vec{u}^2}(\vec{u}_m(\vec{v})) \right]^{-1}$$

symm. Matrix

und die Eigenwerte von inversen Matrizen paarweise invers sind (also sind alle Eigenwerte positiv).

Wir zeigen noch explizit, dass die Lösung $\vec{u}_m(\vec{v})$ von Δ eindeutig ist.

Angenommen, es gäbe 2 verschiedene Lösungen $\vec{u}_1 \neq \vec{u}_2$, d.h. $\vec{u}_{21} = \vec{u}_2 - \vec{u}_1 \neq 0$. Dann folgt:

$$0 = \left[\underbrace{\left(\frac{\partial F}{\partial \ddot{u}} \right) (\ddot{u}_2) - \left(\frac{\partial F}{\partial \ddot{u}} \right) (\ddot{u}_1)}_{=0 \text{ wegen } \Delta} \right] \cdot \ddot{u}_2$$

$$= \int_{\ddot{u}_1}^{\ddot{u}_2} d\ddot{u} \cdot \left[\left(\frac{\partial^2 F}{\partial \ddot{u}^2} \right) (\ddot{u}) \ddot{u}_2 \right]$$

$$= \int_0^1 d\lambda \underbrace{\ddot{u}_2^T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \ddot{u}^2} \right) (\ddot{u}_1 + \lambda \ddot{u}_2)}_{>0 \text{ n.v.}} \ddot{u}_2 > 0 \quad \text{⚡}$$

1.12.08

Die Legendre-Transformierte G von F folgt nun als $G(\vec{v}) = \tilde{G}(\vec{v}, \ddot{u}_m(\vec{v})) = \vec{v} \cdot \ddot{u}_m(\vec{v}) - F(\ddot{u}_m(\vec{v}))$

Um die Konvexität von G zu überprüfen, leiten wir ab:

$$\frac{\partial G}{\partial \vec{v}}(\vec{v}) = \ddot{u}_m(\vec{v}) + \underbrace{\left[\frac{\partial \ddot{u}_m}{\partial \vec{v}} \right]^T}_{\substack{\text{Zeile} \\ \text{Spalte, weil } \vec{v} \text{ Spaltenvektor ist}}} \left(\vec{v} - \underbrace{\frac{\partial F}{\partial \ddot{u}}(\ddot{u}_m(\vec{v}))}_{=0 \text{ } \Delta} \right)$$

$$\frac{\partial^2 G}{\partial \vec{v}^2}(\vec{v}) = \frac{\partial \ddot{u}_m}{\partial \vec{v}}(\vec{v}) \quad \text{pos. definit (s.o.)}$$

$G(\vec{v})$ ist also (wie $F(\ddot{u})$) strikt konvex.

Rücktransformation: wir führen wieder eine Hilfsfunktion ein:

$$\tilde{F}(\ddot{u}, \vec{v}) = \ddot{u} \cdot \vec{v} - G(\vec{v}) = \ddot{u} \cdot \vec{v} - [\vec{v} \cdot \ddot{u}_m(\vec{v}) - F(\ddot{u}_m(\vec{v}))]$$

Diese ist strikt konkav als Fkt. von \vec{v} und hat somit ein eindeutiges Maximum bei $\vec{v}_m(\ddot{u})$ mit

$$\vec{0} = \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \vec{v}}(\ddot{u}, \vec{v}_m(\ddot{u})) = \ddot{u} - \frac{\partial G}{\partial \vec{v}}(\vec{v}_m(\ddot{u})) = \ddot{u} - \ddot{u}_m(\vec{v}_m(\ddot{u}))$$

Es folgt wiederum, dass $\vec{u}_m(\vec{v})$ und $\vec{v}_m(\vec{u})$ als Funktionen invers sind: $\vec{u}_m(\vec{v}_m(\vec{u})) = \vec{u}$, $\vec{v}_m(\vec{u}_m(\vec{v})) = \vec{v}$.

Die Legendre-Transformierte von G ist damit:

$$F^*(\vec{u}) = \tilde{F}(\vec{u}, \vec{v}_m(\vec{u})) = \vec{v}_m \cdot [\vec{u} - \vec{u}_m(\vec{v}_m(\vec{u}))] + F(\vec{u}_m(\vec{v}_m(\vec{u}))) \\ = F(\vec{u})$$

Auch im mehrdimensionalen Fall sind also F und G dual.

Die Young'sche Ungleichung $\vec{u} \cdot \vec{v} \leq F(\vec{u}) + G(\vec{v})$ ↓ n Terme!

folgt z.B. aus $\vec{u} \cdot \vec{v} - F(\vec{u}) = \tilde{G}(\vec{v}, \vec{u}) \leq \tilde{G}(\vec{v}, \vec{u}_m(\vec{v})) = G(\vec{v})$.

Beispiel: $F(\vec{u}) = \frac{1}{2} |\vec{u}|^2 \rightsquigarrow G(\vec{v}) = \frac{1}{2} |\vec{v}|^2$ (selbst-dual)

mit Young'scher Ungleichung $\vec{u} \cdot \vec{v} \leq \frac{1}{2} |\vec{u}|^2 + \frac{1}{2} |\vec{v}|^2$

8.1.2 Funktionen mit zusätzlichen „Dummy-Variablen“

Weitere Verallgemeinerung: Funktionen $F(\vec{u}, \vec{w})$ mehrerer Variabler, die nur bezüglich der \vec{u} -Variablen Legendre-transformiert werden. In der Anwendung auf die Lagrange-funktion entspricht $\vec{u} \equiv \dot{\vec{q}}$, $\vec{w} \equiv \{\vec{q}, t\}$.

Grundsätzlich lassen sich die Ergebnisse von 8.1.1 mit folgenden Ersetzungen übertragen:

$F(\vec{u}) \rightarrow F(\vec{u}, \vec{w})$; $\tilde{G}(\vec{v}, \vec{u}) \rightarrow \tilde{G}(\vec{v}, \vec{u}, \vec{w})$; $\vec{u}_m(\vec{v}) \rightarrow \vec{u}_m(\vec{v}, \vec{w})$
 $G(\vec{v}) \rightarrow G(\vec{v}, \vec{w})$ etc. Insbesondere gilt also:

$$\vec{v} = \frac{\partial F}{\partial \vec{u}}(\vec{u}_m(\vec{v}, \vec{w}), \vec{w}); G(\vec{v}, \vec{w}) = \vec{v} \cdot \vec{u}_m(\vec{v}, \vec{w}) - F(\vec{u}_m(\vec{v}, \vec{w}), \vec{w})$$

Im Folgenden werden insbesondere Ableitungen und Differentiale von $G(\vec{v}, \vec{w})$ benötigt.

$$\frac{\partial G}{\partial \vec{v}}(\vec{v}, \vec{w}) = \vec{u}_m(\vec{v}, \vec{w}) \quad = 0$$

$$\frac{\partial G}{\partial \vec{w}}(\vec{v}, \vec{w}) = \left[\frac{\partial \vec{u}_m}{\partial \vec{w}}(\vec{v}, \vec{w}) \right] \left[\vec{v} - \frac{\partial F}{\partial \vec{u}}(\vec{u}_m(\vec{v}, \vec{w}), \vec{w}) \right] - \frac{\partial}{\partial \vec{w}} F(\vec{u}_m(\vec{v}, \vec{w}), \vec{w})$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \vec{w}} F(\vec{u}_m(\vec{v}, \vec{w}), \vec{w})$$

Damit lauten die totalen Differentiale:

$$dG = \vec{u}_m(\vec{v}, \vec{w}) d\vec{v} - \frac{\partial F}{\partial \vec{w}}(\vec{u}_m(\vec{v}, \vec{w}), \vec{w}) \cdot d\vec{w}$$

$$dF = \vec{v}_m(\vec{u}, \vec{w}) d\vec{u} - \frac{\partial G}{\partial \vec{w}}(\vec{v}_m(\vec{u}, \vec{w}), \vec{w}) \cdot d\vec{w}$$

8.1.3 Anwendung auf die Lagrange-Funktion

Die Legendre-Transformation ist für die Lagrange-Funktion (i.A. **nur**) bezüglich der Geschwindigkeits-Variablen $\dot{\vec{q}}$ möglich, da diese in den relevanten Fällen eine strikt konvexe Funktion von $\dot{\vec{q}}$ ist (siehe 7.6.2).

Formal führen wir bei der Legendre-Transformation als neue Variable den **kanonisch** zu $\dot{\vec{q}}$ **konjugierten Impuls** $\vec{p} = (p_1, p_2, \dots, p_f)$ ein und die Hilfsfunktion

$$\tilde{H}(\vec{q}, \vec{p}, \dot{\vec{q}}, t) \equiv \vec{p} \cdot \dot{\vec{q}} - L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t)$$

\tilde{H} ist strikt konkav in $\dot{\vec{q}}$ \leadsto **eindeutiges** Maximum für $\dot{\vec{q}} = \dot{\vec{q}}_m(\vec{q}, \vec{p}, t)$ mit der Bestimmungsgleichung

$$\vec{0} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \vec{q}} (\vec{q}, \vec{p}, \dot{\vec{q}}_m | t) = \vec{p} - \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{q}}} (\vec{q}, \dot{\vec{q}}_m (\vec{q}, \vec{p}, t), t) \quad (*)$$

Die Legendre-Transformierte von $L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t)$ ist also die **Hamilton-Funktion**

$$H(\vec{q}, \vec{p}, t) = \tilde{H}(\vec{q}, \vec{p}, \dot{\vec{q}}_m | t) = \vec{p} \cdot \dot{\vec{q}}_m(\vec{q}, \vec{p}, t) - L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}_m(\vec{q}, \vec{p}, t), t)$$

Folgerungen: (i) der Ausdruck $\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{q}}}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}_m | t)$ bestimmt $\dot{\vec{q}}_m(\vec{q}, \vec{p}, t)$ (und damit die Hamilton-Funktion) eindeutig.
 (ii) $H(\vec{q}, \vec{p}, t)$ ist konvex als Funktion von \vec{p} .

Damit ist die Rücktransformation möglich (siehe Skript), so dass L und H in diesem Sinne dual sind.

Die Differentiale können also wie folgt geschrieben werden:

$$dH = \dot{\vec{q}}_m(\vec{q}, \vec{p}, t) \cdot d\vec{p} - \frac{\partial L}{\partial \vec{q}}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}_m | t) \cdot d\vec{q} - \frac{\partial L}{\partial t}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}_m | t) dt$$

$$dL = \vec{p}_m(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) \cdot d\dot{\vec{q}} - \frac{\partial H}{\partial \vec{q}}(\vec{q}, \vec{p}_m | t) \cdot d\vec{q} - \frac{\partial H}{\partial t}(\vec{q}, \vec{p}_m | t) dt$$

Andererseits gilt z.B.

$$dH(\vec{q}, \vec{p}, t) = \frac{\partial H}{\partial \vec{q}} \cdot d\vec{q} + \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \cdot d\vec{p} + \frac{\partial H}{\partial t} dt$$

Schließlich finden wir als Kuriosum die

Young'sche Ungleichung

$$\vec{p} \cdot \dot{\vec{q}} \leq L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) + H(\vec{q}, \vec{p}, t)$$

Nicht-Eindeutigkeit der Hamilton-Funktion

Wie in **Kap. 7** diskutiert, sind Lagrange-Funktionen L, L' äquivalent, die sich nur um eine totale Zeitableitung unterscheiden: $L' = L + \frac{d\lambda}{dt}(\vec{q}, t) = L + \frac{\partial \lambda}{\partial \vec{q}}(\vec{q}, t) \cdot \dot{\vec{q}} + \frac{\partial \lambda}{\partial t}(\vec{q}, t)$

Bei der Legendre-Transformation ändert sich durch λ die Hilfsfunktion \tilde{H} ; die Position des Maximums verschiebt sich von \vec{q}_m auf \vec{q}'_m mit

$$\vec{p} = \frac{\partial L'}{\partial \dot{\vec{q}}}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}'_m, t) = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{q}}}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}'_m, t) + \frac{\partial \lambda}{\partial \dot{\vec{q}}}(\vec{q}, t)$$

hieraus folgt (**wichtig!** λ nicht von $\dot{\vec{q}}$ abhängig!)

$$\dot{\vec{q}}'_m(\vec{q}, \vec{p}, t) = \dot{\vec{q}}_m(\vec{q}, \vec{p} - \frac{\partial \lambda}{\partial \dot{\vec{q}}}, t)$$

Damit ist die Hamilton-Funktion

$$\begin{aligned} H'(\vec{q}, \vec{p}, t) &= \vec{p} \cdot \dot{\vec{q}}'_m - L' = \vec{p} \cdot \dot{\vec{q}}'_m - L - \frac{\partial \lambda}{\partial \dot{\vec{q}}} \cdot \dot{\vec{q}}'_m - \frac{\partial \lambda}{\partial t} \\ &= (\vec{p} - \frac{\partial \lambda}{\partial \dot{\vec{q}}}) \cdot \dot{\vec{q}}'_m - L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}'_m, t) - \frac{\partial \lambda}{\partial t}(\vec{q}, t) \\ &= H(\vec{q}, \vec{p} - \frac{\partial \lambda}{\partial \dot{\vec{q}}}, t) - \frac{\partial \lambda}{\partial t} \end{aligned}$$

mit $H(\vec{q}, \vec{p}, t)$ äquivalent.

Die Hamilton-Gleichungen

Wir wollen jetzt die Bewegungsgleichungen herleiten, die die zunächst unabhängigen Variablen \vec{q}, \vec{p}, t der Hamilton-Funktion für die physikalische Bahn verknüpfen.

Mit dem verallgemeinerten Impuls $\vec{p}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{q}}}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t)$

können wir die Lagrange-Gleichungen umschreiben:

$$\dot{\vec{p}}_\phi(t) = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{q}}}(\vec{q}_\phi(t), \dot{\vec{q}}_\phi(t), t) = \frac{\partial L}{\partial \vec{q}}(\vec{q}_\phi(t), \dot{\vec{q}}_\phi(t), t) \quad (\Delta)$$

$$\text{mit } \vec{p}_\phi(t) = \vec{p}(\vec{q}_\phi(t), \dot{\vec{q}}_\phi(t), t)$$

Aus den verschiedenen Darstellungen für dH in 8.1.3

$$\text{folgt } \frac{\partial H}{\partial \vec{q}}(\vec{q}, \vec{p}, t) = - \frac{\partial L}{\partial \vec{q}}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t); \quad \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}(\vec{q}, \vec{p}, t) = \dot{\vec{q}}$$

Mit $\dot{\vec{q}}_\phi = \dot{\vec{q}}_\phi(\vec{q}_\phi, \vec{p}_\phi, t)$ gilt insbesondere für die physikalische Bahn:

$$\frac{\partial L}{\partial \vec{q}}(\vec{q}_\phi, \dot{\vec{q}}_\phi, t) = - \frac{\partial H}{\partial \vec{q}}(\vec{q}_\phi, \vec{p}_\phi, t), \quad \dot{\vec{q}}_\phi = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}(\vec{q}_\phi, \vec{p}_\phi, t)$$

Einsetzen in Δ liefert die **Hamilton-Gleichungen**

$$\dot{\vec{p}}_\phi = - \frac{\partial H}{\partial \vec{q}}(\vec{q}_\phi, \vec{p}_\phi, t), \quad \dot{\vec{q}}_\phi = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}(\vec{q}_\phi, \vec{p}_\phi, t)$$

oder kurz:

$$\dot{\vec{p}} = - \frac{\partial H}{\partial \vec{q}}; \quad \dot{\vec{q}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}$$

Das sind 2f Gleichungen für die 2f Unbekannten $\vec{q}_\phi(t), \vec{p}_\phi(t) \rightsquigarrow$ vollständig bestimmt. // 3.12.08

Theorie II: Vorlesung 15

Notiztitel

07.12.2008

Aus den Hamilton-Gleichungen folgt

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} H_\phi(t) &= \frac{d}{dt} H(\vec{q}_\phi, \vec{p}_\phi, t) = \left(\frac{\partial H}{\partial \vec{q}}\right)_\phi \cdot \dot{\vec{q}}_\phi + \left(\frac{\partial H}{\partial \vec{p}}\right)_\phi \cdot \dot{\vec{p}}_\phi + \left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_\phi \\ &= \left(\frac{\partial H}{\partial \vec{q}}\right)_\phi \left(\frac{\partial H}{\partial \vec{p}}\right)_\phi - \left(\frac{\partial H}{\partial \vec{p}}\right)_\phi \left(\frac{\partial H}{\partial \vec{q}}\right)_\phi + \left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_\phi \\ &= \left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_\phi = -\left(\frac{\partial L}{\partial t}\right)_\phi\end{aligned}$$

Also ist H_ϕ erhalten, falls H (und somit auch L) nicht explizit zeitabhängig ist. Dann ist (bei zeitunabhängigem $\vec{x}_i(\vec{q})$) $H_\phi = \mathcal{J}_\phi = E$, also auch die Energie erhalten.

\uparrow Obs. der H-Theorie
 \uparrow Observable der L-Theorie
 \uparrow Messgröße

Observablen und Messgrößen

Auch allgemein entspricht die Messgröße A im Lagrange- bzw. Hamilton-Formalismus jeweils verschiedenen Observablen $A_L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t)$ bzw. $A_H(\vec{q}, \vec{p}, t)$, die für die physikalische Bahn jedoch gleich sind:

$$A_L(\vec{q}_\phi, \dot{\vec{q}}_\phi, t) = A_H(\vec{q}_\phi, \vec{p}_\phi, t) = A_\phi(t)$$

Analoges gilt natürlich für die Newton'sche Mechanik, d.h. in kartesischen Koordinaten: $A_\phi(t) = A_N(\vec{x}_\phi, \dot{\vec{x}}_\phi, t)$

Zum Beispiel gilt für ein Teilchen im Potential $V(\vec{x})$:

$$A_{L,N}(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) = \begin{cases} m\dot{\vec{x}} \\ m\vec{x} \times \dot{\vec{x}} \\ \frac{1}{2}m|\dot{\vec{x}}|^2 + V(\vec{x}) \end{cases}; \quad A_H(\vec{x}, \vec{p}, t) = \begin{cases} \vec{p} & \text{Impuls} \\ \vec{x} \times \vec{p} & \text{Drehimpuls} \\ (|\vec{p}|^2/2m + V(\vec{x})) & \text{Energie} \end{cases}$$

Für ein geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld ist der (nicht eichinvariante) verallg. Impuls $\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} = m\dot{\vec{x}} + q\vec{A}(\vec{x}, t)$ keine Messgröße, jedoch sind dies die kinetischen Größen

$$A_{L,N}(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) = \begin{cases} m\dot{\vec{x}} \\ m\vec{x} \times \dot{\vec{x}} \\ \frac{1}{2}m|\dot{\vec{x}}|^2 \end{cases}; \quad A_H(\vec{x}, \vec{p}, t) = \begin{cases} (\vec{p} - q\vec{A}(\vec{x}, t)) & \text{k. Impuls} \\ \vec{x} \times (\vec{p} - q\vec{A}(\vec{x}, t)) & \text{k. Drehimpuls} \\ \frac{1}{2m}|\vec{p} - q\vec{A}(\vec{x}, t)|^2 & \text{k. Energie} \end{cases}$$

Forminvarianz der Hamilton-Gleichungen?

→ siehe Skript.

Wichtiger Punkt: $\dot{q}_\phi(t), \ddot{q}_\phi(t)$ sind Messgrößen, $\vec{p}_\phi(t)$ nicht!

8.2 Beispiele für die Wirkung des Hamilton-Formalismus

8.2.1 Geschwindigkeitsunabhängige Kräfte

Konservative/wirbelfreie Kräfte $\leadsto L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = T(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) - V(\vec{q}, t)$

$$\text{mit } T(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = \frac{1}{2} \sum_{e,e'} a_{ee'}(\vec{q}, t) \dot{q}_e \dot{q}_{e'} + \sum_e a_e(\vec{q}, t) \dot{q}_e + a_0(\vec{q}, t)$$

$$\equiv \frac{1}{2} \dot{\vec{q}}^T \mathcal{M}(\vec{q}, t) \dot{\vec{q}} + \vec{a}(\vec{q}, t) \cdot \dot{\vec{q}} + a_0(\vec{q}, t)$$

„Massentensor“ (symmetrisch, pos. definit)

a) Spezialfall $\vec{X} = \vec{X}(\vec{q}) \leadsto T = T(\vec{q}, \dot{\vec{q}})$ nicht explizit t -abhängig

$$\Rightarrow T(\vec{q}, \dot{\vec{q}}) = \frac{1}{2} \dot{\vec{q}}^T \mathcal{M}(\vec{q}) \dot{\vec{q}}$$

Zur Legendre-Transformation benötigen wir

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{q}}}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = M(\vec{q}) \dot{\vec{q}}; \quad \dot{\vec{q}} = M(\vec{q})^{-1} \vec{p}$$

Damit folgt die Hamilton-Funktion als

$$\begin{aligned} H(\vec{q}, \vec{p}, t) &= \vec{p} \cdot \dot{\vec{q}} - L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = \vec{p}^T (M^{-1})^T M \vec{p} = \vec{p}^T M^{-1} M \vec{p} = \vec{p}^T \\ &= \vec{p}^T M(\vec{q})^{-1} \vec{p} - \left[\frac{1}{2} (M^{-1} \vec{p})^T M (M^{-1} \vec{p}) - V(\vec{q}, t) \right] \\ &= \frac{1}{2} \vec{p}^T M(\vec{q})^{-1} \vec{p} + V(\vec{q}, t) = T(\vec{q}, \vec{p}) + V(\vec{q}, t) \end{aligned}$$

und die Hamilton-Gleichungen lauten

$$\dot{\vec{q}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} = M(\vec{q})^{-1} \vec{p}$$

$$\dot{p}_a = -\frac{\partial H}{\partial q_a} = \frac{1}{2} \vec{p}^T \left(-\frac{\partial M(\vec{q})^{-1}}{\partial q_a} \right) \vec{p} + \frac{\partial V}{\partial q_a}$$

$$= \frac{1}{2} \vec{p}^T \left(M^{-1} \frac{\partial M}{\partial q_a} M^{-1} \right) \vec{p} - \frac{\partial V}{\partial q_a}$$

$$\left(\begin{array}{l} * : \mathbb{1} = M^{-1} M \xrightarrow{\frac{\partial}{\partial q_a}} \vec{0} = \frac{\partial}{\partial q_a} (M^{-1} M) + M^{-1} \frac{\partial M}{\partial q_a} \\ \Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial q_a} (M^{-1}) = -M^{-1} \frac{\partial M}{\partial q_a} M^{-1} \end{array} \right)$$

Beispiele: (i) Einzelnes Teilchen mit $L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) = \frac{1}{2} m |\dot{\vec{x}}|^2 - V(\vec{x}, t)$

$$\rightarrow H(\vec{q}, \vec{p}, t) = \frac{|\vec{p}|^2}{2m} + V(\vec{x}, t)$$

$$\text{Hamilton-Gleichungen: } \dot{\vec{x}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} = \frac{\vec{p}}{m}; \quad \dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{x}} = -\frac{\partial V}{\partial \vec{x}}(\vec{x}, t)$$

(ii) Isotroper harmonischer Oszillator: $V(\vec{x}) = \frac{1}{2} m \omega^2 |\vec{x}|^2$

$$\rightarrow L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}) = \frac{1}{2} m |\dot{\vec{x}}|^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 |\vec{x}|^2; \quad H(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{|\vec{p}|^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 |\vec{x}|^2$$

hohe Symmetrie $\vec{x} \leftrightarrow \vec{p}$!

Hamilton-Gl: $\dot{\vec{x}} = \frac{\vec{p}}{m}; \quad \dot{\vec{p}} = -m\omega^2 \vec{x}$ (L-Gl: $\ddot{\vec{x}} = -\omega^2 \vec{x}$)

b) allgemeinerer Fall $T(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t)$

$$\rightarrow \vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{q}}}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = M(\vec{q}, t) \dot{\vec{q}} + \vec{a}(\vec{q}, t); \quad \dot{\vec{q}} = M^{-1}(\vec{p} - \vec{a})$$

Damit hat die Hamilton-Funktion

$$\begin{aligned} H(\vec{q}, \vec{p}, t) &= \vec{p} \cdot \dot{\vec{q}} - L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) \\ &= \vec{p}^T M^{-1}(\vec{p} - \vec{a}) - \left[\frac{1}{2} (\vec{p} - \vec{a})^T M^{-1}(\vec{p} - \vec{a}) + \vec{a}^T M^{-1}(\vec{p} - \vec{a}) \right. \\ &\quad \left. + a_0(\vec{q}, t) + V(\vec{q}, t) \right] \\ &= \frac{1}{2} (\vec{p} - \vec{a})^T M^{-1}(\vec{p} - \vec{a}) + [V(\vec{q}, t) - a_0(\vec{q}, t)] \end{aligned}$$

i.A. **nicht** die Struktur $H = T + V$!

Noch die Hamilton-Gleichungen: $\dot{\vec{q}} = M^{-1}(\vec{p} - \vec{a})$

$$\dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k} = \frac{1}{2} (\vec{p} - \vec{a})^T M^{-1} \frac{\partial M}{\partial q_k} M^{-1}(\vec{p} - \vec{a}) + (\vec{p} - \vec{a})^T M^{-1} \frac{\partial \vec{a}}{\partial q_k} + \frac{\partial a_0}{\partial q_k} - \frac{\partial V}{\partial q_k}$$

8.2.2 Lorentz-Kräfte

Für Systeme geladener Teilchen im elm. Feld gilt [7.6.2]

$$L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = T(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) - V_G(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) \text{ mit } V_G = V + V_{\text{Lor}}$$

$$V_{\text{Lor}}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = \phi(\vec{q}, t) - \vec{A}(\vec{q}, t) \cdot \dot{\vec{q}}, \text{ wobei}$$

$\vec{A} = (A_1, A_2, \dots, A_f)$ das verallgemeinerte Vektorpotential zusammenfasst. Es folgt

$$\begin{aligned} L = T - V - V_{\text{Lor}} &= \left(\frac{1}{2} \dot{\vec{q}}^T M \dot{\vec{q}} + \vec{a} \cdot \dot{\vec{q}} + a_0 \right) - V - (\phi - \vec{A} \cdot \dot{\vec{q}}) \\ &= \frac{1}{2} \dot{\vec{q}}^T M \dot{\vec{q}} + (\vec{a} + \vec{A}) \cdot \dot{\vec{q}} - (V - a_0 + \phi) \end{aligned}$$

was genau dem oben diskutierten Fall mit den Ersetzungen $\ddot{a} \rightarrow \ddot{a} + \ddot{A}$ und $a_0 \rightarrow a_0 - \phi$ entspricht.

$$\rightarrow H(\dot{q}, \dot{p}, t) = \frac{1}{2} (\dot{p} - \dot{a} - \dot{A})^T M^{-1} (\dot{p} - \dot{a} - \dot{A}) + V(\dot{q}, t) - a_0(\dot{q}, t) + \phi(\dot{q}, t)$$

Beispiel: N nicht-ww Teilchen, kartesische Koordinaten:

$$\rightarrow T = \sum_i \frac{1}{2} m_i |\dot{\vec{x}}_i|^2, \quad \ddot{A}(\dot{q}, t) = (\hat{q}_1 \ddot{A}(\vec{x}_1, t), \dots, \hat{q}_N \ddot{A}(\vec{x}_N, t));$$

$$\phi(\dot{q}, t) = \sum_{i=1}^N \hat{q}_i \phi^k(\vec{x}_i, t)$$

$$\rightarrow H(\vec{x}, \vec{p}, t) = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{1}{2m_i} [\vec{p}_i - \hat{q}_i \ddot{A}(\vec{x}_i, t)]^2 + \hat{q}_i \phi^k(\vec{x}_i, t) \right\}$$

„minimale Kopplung“ - ganz analog in Quantenmechanik

(8.2.3 Kleine Schwingungen ausgelassen)

8.3 Ein Variationsprinzip für die Hamilton-Gleichungen

Betrachte (wieder) physikalische Bahn $(\vec{q}_\phi(t), \vec{p}_\phi(t))$ im Phasenraum sowie benachbarte Bahnen $(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$, wobei die Ortskoordinaten zu den Anfangs- und Endzeiten übereinstimmen: $\vec{q}(t_1) = \vec{q}_\phi(t_1) \equiv \vec{q}_1$; $\vec{q}(t_2) = \vec{q}_\phi(t_2) \equiv \vec{q}_2$

Für die Variationen

$$(\delta \vec{q})(t) = \vec{q}(t) - \vec{q}_\phi(t) \equiv \varepsilon \vec{\kappa}(t), \quad (\delta \vec{p})(t) = \vec{p}(t) - \vec{p}_\phi(t) \equiv \varepsilon \vec{\pi}(t)$$

gilt somit $\vec{\kappa}(t_1) = \vec{\kappa}(t_2) = \vec{0}$, während $\vec{\pi}(t_1)$ und $\vec{\pi}(t_2)$ beliebig (aber endlich) sind.

Das Wirkungsfunktional definieren wir nun über die in [8.1.3] eingeführte Hilfsfunktion \tilde{L} :

$$\begin{aligned} \tilde{S}(\vec{q}_2, t_2) - \tilde{S}(\vec{q}_1, t_1) &= \int_{t_1}^{t_2} dt \tilde{L}(\vec{q}(t), \dot{\vec{q}}(t), \vec{p}(t), t) \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt [\dot{\vec{q}}(t) \vec{p}(t) - H(\vec{q}(t), \vec{p}(t), t)] \end{aligned}$$

und bestimmen seinen stationären Punkt:

$$\begin{aligned} 0 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} (\delta \tilde{S})_{(\vec{q}_1, t_1)}^{(\vec{q}_2, t_2)} [\vec{q}_\phi + \epsilon \vec{\kappa}, \vec{p}_\phi + \epsilon \vec{\pi}] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\left(\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \vec{q}} \right)_\phi \cdot \vec{\kappa}(t) + \left(\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{\vec{q}}} \right)_\phi \cdot \dot{\vec{\kappa}}(t) + \left(\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \vec{p}} \right)_\phi \cdot \vec{\pi}(t) \right] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \left[\left(\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \vec{q}} \right)_\phi - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{\vec{q}}} \right)_\phi \right] \cdot \vec{\kappa}(t) + \left(\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \vec{p}} \right)_\phi \cdot \vec{\pi}(t) \right\} \end{aligned}$$

$\vec{\kappa}, \vec{\pi}$ beliebig

$$\Leftrightarrow \vec{0} = \left(\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \vec{q}} \right)_\phi - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{\vec{q}}} \right)_\phi = - \frac{\partial H}{\partial \vec{q}}(\vec{q}_\phi, \vec{p}_\phi, t) - \dot{\vec{p}}_\phi$$

$$\vec{0} = \left(\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \vec{p}} \right)_\phi = \dot{\vec{q}}_\phi - \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}(\vec{q}_\phi, \vec{p}_\phi, t)$$

Wir haben also die Hamilton-Gleichungen als stationären Punkt eines Wirkungsfunktional abgeleitet: „modifiziertes Hamilton'sches Prinzip“.

Durch nochmalige Erweiterung des Funktionals mit $\tilde{L}(\vec{q}, \vec{p}, \vec{v}, \dot{\vec{q}}, t)$ lassen sich Lagrange- und Hamilton-Gleichungen auch gleichzeitig herleiten \rightarrow Skript.

8.12.08

Theorie II: Vorlesung 16

Notiztitel

09.12.2008

8.2.3 Kleine Schwingungen

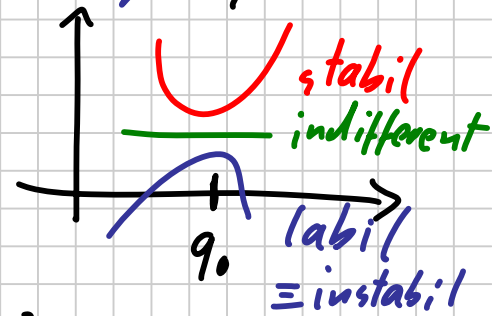
Wir betrachten nochmals den Fall $T = T(\dot{\vec{q}}, \dot{\vec{q}})$ [8.2.1 a)] und nehmen an, dass auch V zeitunabhängig ist:

$$L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}) = T(\dot{\vec{q}}, \dot{\vec{q}}) - V(\vec{q}); \quad T = \frac{1}{2} \dot{\vec{q}}^T M(\vec{q}) \dot{\vec{q}},$$

$$H(\vec{q}, \vec{p}) = \frac{1}{2} \vec{p}^T M^{-1}(\vec{q}) \vec{p} + V(\vec{q})$$

wobei V eine nicht instabile Gleichgewichtslage \vec{q}_0 hat:

$$F_k(\vec{q}_0) = \frac{\partial V}{\partial q_k}(\vec{q}_0) = 0 \quad \forall k = 1, \dots, f$$



Wir entwickeln das Potential um \vec{q}_0 :

$$V(\vec{q}) = V(\vec{q}_0) + \frac{\partial V}{\partial \vec{q}}(\vec{q}_0) \cdot (\vec{q} - \vec{q}_0) + \frac{1}{2} (\vec{q} - \vec{q}_0)^T \frac{\partial^2 V}{\partial \vec{q}^2}(\vec{q}_0) (\vec{q} - \vec{q}_0) + \dots$$

0 n.v.

O.B.d.A. verschieben wir Koordinatensystem und Energie nullpunkt so dass $\vec{q}_0 = 0, V(\vec{q}_0) = 0$

$\rightarrow V(\vec{q}) = \frac{1}{2} \vec{q}^T B \vec{q}$ mit reeller, symmetrischer, positiv semidefiniter Potentialmatrix $B = \frac{\partial^2 V}{\partial \vec{q}^2}(\vec{q}_0)$

Mit dem Massentensor (reell, symmetrisch, positiv definit) $M(\vec{q}_0) \equiv M$ erhalten wir in quadratischer Ordnung:

$$L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}) = \frac{1}{2} \dot{\vec{q}}^T M \dot{\vec{q}} - \frac{1}{2} \vec{q}^T B \vec{q}$$

$$H(\vec{q}, \vec{p}) = \frac{1}{2} \vec{p}^T M^{-1} \vec{p} + \frac{1}{2} \vec{q}^T B \vec{q}$$

a) Lagrange-Gleichungen und Lagrange-Funktion

Die Lagrange-Gleichung $\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) = \frac{\partial L}{\partial q}$ lautet hier:

$$M \ddot{q} = -B \dot{q} \quad (*) \Leftrightarrow \sum_{e=1}^f M_{ke} \dot{q}_e = \sum_{e=1}^f B_{ke} q_e \quad \forall k=1, \dots, f$$

f linear gekoppelte Differentialgleichungen \rightarrow allgemeine Strategie: Entkopplung durch orthogonale Transformationen

Im Unterschied zum kartesischen Fall ($\dot{q} \equiv \dot{x}$; $M_{ke} = m_k \delta_{ke}$) sind die f Differentialgleichungen i.A. nicht nur durch B, sondern auch durch den Massentensor M gekoppelt.

Naive Idee: multipliziere mit $M^{-1} \rightarrow \ddot{q} = M^{-1} B \dot{q}$

Problem: $M^{-1} B$ ist i.A. nicht symmetrisch

Daher gehen wir schrittweise vor (divide et impera)

M ist reell + symmetrisch (=hermitesch), also ^{numerisch} diagonalisierbar

mit $O_1^T M O_1 = M_D \equiv \text{diag}(\mu_1, \dots, \mu_f) \Leftrightarrow M = O_1 M_D O_1^T$
 \uparrow orthogonale Matrix: $O^T = O^{-1} \Rightarrow (O\dot{x}) \cdot (O\dot{y}) = \dot{x} \cdot \dot{y}$

Def.: mit transformierten Koordinaten $\dot{q} = O_1 \dot{q}'$ gilt:

$$* \Leftrightarrow M O_1 \ddot{q}' = -B O_1 \dot{q}'$$

$$O_1 M_D \ddot{q}' = -B O_1 \dot{q}'$$

$$M_D \ddot{q}' = -O_1^T B O_1 \dot{q}'$$

Die Diagonalmatrix wird durch eine Umskalierung (i.A. nicht-orthogonale Trafo) eliminiert: $\dot{q}' = M_D^{-1/2} \dot{q}''$

$$\rightarrow \underbrace{M_D M_D^{-1/2}}_{M_D^{1/2}} \ddot{\vec{q}}'' = - O_1^T B O_1 M_D^{-1/2} \vec{q}''$$

$$\ddot{\vec{q}}'' = - B' \vec{q}''$$

mit $B' = M_D^{-1/2} O_1^T B O_1 M_D^{-1/2}$ reell, symmetrisch
 also diagonalisierbar: $O_2^T B' O_2 = B_D' = \text{diag}(\beta_1, \dots, \beta_f)$
 und positiv semidefinit: $\beta_k \geq 0 \quad \forall k=1, \dots, f$

Durch entsprechende Transformation der Koordinaten:

$$\vec{q}'' = O_2 \vec{z}$$

vereinfachen sich die Bewegungsgleichungen zu

$$\boxed{\ddot{\vec{z}} = -B_D \vec{z}} \quad \Delta \quad (\Leftrightarrow) \quad \ddot{z}_k = -\beta_k z_k \quad \forall k=1, \dots, f$$

f **entkoppelte** Bewegungsgleichungen: harm. für $\beta_k \equiv \omega_k^2 > 0$
 frei für $\beta_k = 0$

Eigenlösungen: $\vec{z}^{(\mu)}(t) = z_\mu(t) \hat{e}_\mu$ mit Eigenfrequenz

$$z_\mu(t) = z_\mu(0) \cos(\omega_\mu t) + \frac{\dot{z}_\mu(0)}{\omega_\mu} \sin(\omega_\mu t) \quad \text{für } \omega_\mu = \sqrt{\beta_\mu} > 0$$

$$z_\mu(t) = z_\mu(0) + \dot{z}_\mu(0) t \quad \text{für } \beta_\mu = 0$$

\uparrow Normalkoordinaten

Eigenschwingungen in den ursprünglichen Koordinaten:

$$\vec{q}^{(\mu)}(t) = O_1 M_D^{-1/2} O_2 \vec{z}^{(\mu)}(t) = z_\mu(t) \vec{q}_\mu; \quad \vec{q}_\mu = O_1 M_D^{-1/2} O_2 \hat{e}_\mu$$

Die Vektoren \mathbf{q}_μ bilden einen vollständigen Satz „ M -orthonormaler“ Vektoren:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_\mu^T M \mathbf{q}_{\mu'} &= (\mathcal{O}_1 M_D^{-1/2} \mathcal{O}_2 \hat{\mathbf{e}}_\mu)^T M (\mathcal{O}_1 M_D^{-1/2} \mathcal{O}_2 \hat{\mathbf{e}}_{\mu'}) \\ &= \hat{\mathbf{e}}_\mu^T \mathcal{O}_2^T M_D^{-1/2} \mathcal{O}_1^T M \mathcal{O}_1 M_D^{-1/2} \mathcal{O}_2 \hat{\mathbf{e}}_{\mu'} \\ &= \hat{\mathbf{e}}_\mu^T \mathcal{O}_2^T M_D^{-1/2} M_D M_D^{-1/2} \mathcal{O}_2 \hat{\mathbf{e}}_{\mu'} \\ &= \hat{\mathbf{e}}_\mu^T \mathcal{O}_2^T \mathcal{O}_2 \hat{\mathbf{e}}_{\mu'} = \hat{\mathbf{e}}_\mu \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mu'} = \delta_{\mu\mu'} \quad , \end{aligned}$$

die außerdem „ B -orthogonal“ sind:

$$\mathbf{q}_\mu^T B \mathbf{q}_{\mu'} = \hat{\mathbf{e}}_\mu^T \mathcal{O}_2^T B' \mathcal{O}_2 \hat{\mathbf{e}}_{\mu'} = \beta_\mu \delta_{\mu\mu'}$$

und (Rechts-) Eigenvektoren der Matrix $M^{-1}B$ zum Eigenwert β_μ darstellen: Es gilt $\forall \mu, \mu' = 1, 2, \dots, f$

$$\begin{aligned} (M \vec{q}_{\mu'})^T (M^{-1}B - \beta_\mu) \vec{q}_\mu &= \vec{q}_{\mu'}^T (B - \beta_\mu M) \vec{q}_\mu \\ &= (\beta_{\mu'} - \beta_\mu) \delta_{\mu\mu'} = 0 \end{aligned}$$

Da die Vektoren $\{\vec{q}_{\mu'}\}$ und (wegen M positiv definit) auch die Vektoren $\{M \vec{q}_{\mu'}\}$ einen vollständigen Satz bilden, muss gelten: $(M^{-1}B - \beta_\mu) \vec{q}_\mu = 0$ □

Die allgemeine Lösung ergibt sich als Überlagerung von Eigenschwingungen:

$$\vec{q}_\phi(t) = \sum_{\mu=1}^f z_\mu(t) \vec{q}_\mu$$

Dabei werden die Amplituden durch die $2f$ Anfangsbedingungen $\{z_\mu(0)\}$, $\{\dot{z}_\mu(0)\}$ mit $z_\mu(0) = \vec{q}_\phi(0) \cdot \vec{q}_\mu$; $\dot{z}_\mu(0) = \dot{\vec{q}}_\phi(0) \cdot \vec{q}_\mu$ festgelegt.

Statt auf die Bewegungsgleichungen lässt sich die Punkttransformation $\vec{q}(t) \rightarrow \vec{z}(t)$; $\vec{z} = (z_1, \dots, z_f)$ mit $\vec{q}(t) = \sum_{\mu=1}^f z_{\mu}(t) \vec{q}_{\mu}$

auch auf die Lagrange-Funktion anwenden:

$$\bar{L}(\vec{z}, \dot{\vec{z}}) = \frac{1}{2} |\dot{\vec{z}}|^2 - \frac{1}{2} \vec{z}^T B_0 \vec{z},$$

die f ungekoppelten harmonischen Oszillatoren der Masse 1 entspricht und deren Lagrange-Gleichung mit Δ übereinstimmt.

Hamilton-Gleichung und Hamilton-Funktion

Für das ursprüngliche Problem lauten die Hamilton-

Gleichungen: $\dot{\vec{q}} = M^{-1} \vec{p}$; $\dot{\vec{p}} = -B \vec{q}$

oder $\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \vec{q} \\ \vec{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & M^{-1} \\ -B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{q} \\ \vec{p} \end{pmatrix}$

im Phasenraum (\vec{q}, \vec{p}) . Direkte Lösung mit Exponentenzierung der Koeffizientenmatrix nicht praktikabel

Wieder Transformation: $(\vec{q}, \vec{p}) \rightarrow (\vec{z}, \vec{\pi})$ mit

$$\vec{q} = \sum_{\mu} z_{\mu} \vec{q}_{\mu}; \quad \vec{p} = \sum_{\mu} \pi_{\mu} M \vec{q}_{\mu}$$

Einsetzen liefert: $\sum_{\mu} \dot{z}_{\mu} \vec{q}_{\mu} = \dot{\vec{q}} = M^{-1} \vec{p} = \sum_{\mu} \pi_{\mu} \vec{q}_{\mu}$
(entkoppelt; spezielle Wahl von \vec{q}_{μ} unwichtig)

$$\text{bzw. } \sum_{\mu} \pi_{\mu} \ddot{q}_{\mu} = M^{-1} \dot{p} = -M^{-1} B \dot{q} = -\sum_{\mu} z_{\mu} M^{-1} B \dot{q}_{\mu}$$

$$\stackrel{\text{spezielle Wahl}}{\text{der } \ddot{q}_{\mu}} \equiv -\sum_{\mu} \beta_{\mu} z_{\mu} \ddot{q}_{\mu}$$

und damit wegen der Vollständigkeit der $\{\ddot{q}_{\mu}\}$:

$$\ddot{\vec{z}} = \ddot{\vec{\pi}}; \quad \ddot{\vec{\pi}} = -B_D \ddot{\vec{z}} \quad \text{bzw.} \quad \dot{z}_{\mu} = \pi_{\mu}; \quad \dot{\pi}_{\mu} = -\beta_{\mu} z_{\mu}$$

Diese Gleichungen sind echte Hamilton-Gleichungen zur Hamilton-Funktion

$$\bar{H}(\vec{z}, \vec{\pi}) = \frac{1}{2} |\vec{\pi}|^2 + \frac{1}{2} \vec{z}^T B_D \vec{z}$$

(wieder f entkoppelte harm. Oszillatoren)

Eine Transformation $(\vec{q}, \vec{p}) \rightarrow (\vec{q}', \vec{p}')$, die die Struktur der Hamilton-Gleichungen erhält, wird allgemein als **kanonische Transformation** bezeichnet.

Im speziellen Fall lässt sich diese im Lagrange-Formalismus als Punkttransformation interpretieren:

$$\bar{L}(\vec{z}, \dot{\vec{z}}) = \frac{1}{2} |\dot{\vec{z}}|^2 - \frac{1}{2} \vec{z}^T B_D \vec{z},$$

$$\leadsto \vec{\pi} = \frac{\partial \bar{L}}{\partial \dot{\vec{z}}}(\vec{z}, \dot{\vec{z}}, t) = \dot{\vec{z}}$$

$$\bar{H}(\vec{z}, \vec{p}, t) = \vec{\pi} \dot{\vec{z}} - \bar{L}(\vec{z}, \dot{\vec{z}}, t) = \frac{1}{2} \vec{\pi}^2 + \frac{1}{2} \vec{z}^T B_D \vec{z}$$

Die neue Hamilton-Funktion ist also die Legendre-Transformierte einer punkttransformierten Lagrange-Funktion.

10.12.08

Theorie II: Vorlesung 17

Notiztitel

15.12.2008

8.4 Erhaltungsgrößen und Poisson-Klammern

Observable in Hamilton-Theorie: $A_\phi(t) = A(\vec{q}_\phi, \vec{p}_\phi, t)$

→ Zeitentwicklung

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} A_\phi(t) &= \left(\frac{\partial A}{\partial \vec{q}} \right)_\phi \cdot \dot{\vec{q}}_\phi + \left(\frac{\partial A}{\partial \vec{p}} \right)_\phi \cdot \dot{\vec{p}}_\phi + \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)_\phi \\ &= \left(\frac{\partial A}{\partial \vec{q}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial A}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{q}} \right)_\phi + \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)_\phi \\ &= \{A, H\}_\phi + \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)_\phi\end{aligned}$$

Def.: Die Poisson-Klammer zweier Funktionen $A(\vec{q}, \vec{p}, t)$ und $B(\vec{q}, \vec{p}, t)$ ist allgemein definiert als:

$$\{A, B\} \equiv \frac{\partial A}{\partial \vec{q}} \cdot \frac{\partial B}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial A}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial B}{\partial \vec{q}}$$

Speziell gilt für eine Erhaltungsgröße $A(\vec{q}, \vec{p}, t)$

$$\frac{d}{dt} A_\phi = \{A, H\}_\phi + \frac{\partial A}{\partial t} = 0$$

und für die Erhaltungsgröße $A(\vec{q}, \vec{p})$: $\{A, H\}_\phi = 0$

Einige Eigenschaften der Poisson-Klammer:

$$\{A, B\} = -\{B, A\} \quad \text{schiefsymmetrisch}$$

$$\left. \begin{aligned}\{\alpha_1 A_1 + \alpha_2 B_1, B\} &= \alpha_1 \{A_1, B\} + \alpha_2 \{B_1, B\} \\ \{A, \beta_1 B_1 + \beta_2 B_2\} &= \beta_1 \{A, B_1\} + \beta_2 \{A, B_2\}\end{aligned} \right\} \text{bilinear}$$

$$\left. \begin{aligned} \{A, A_2, B\} &= A_1 \{A_2, B\} + A_2 \{A_1, B\} \\ \frac{\partial}{\partial t} \{A, B\} &= \left\{ \frac{\partial A}{\partial t}, B \right\} + \left\{ A, \frac{\partial B}{\partial t} \right\} \end{aligned} \right\} \text{Produktregeln}$$

$$\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0$$

Jacobi-Identität

Poisson-Theorem: die Poisson-Klammer zweier Erhaltungsgrößen ist auch Erhaltungsgröße.

Beweis: n. V. gilt: $\frac{d}{dt} A_q = \{A, H\}_q + \frac{\partial A}{\partial t} = 0$; $\frac{d}{dt} B = \{B, H\}_q + \frac{\partial B}{\partial t} = 0$

$$\frac{d}{dt} \{A, B\} = \left\{ \{A, B\}, H \right\}_q + \left[\frac{\partial}{\partial t} \{A, B\} \right]_q$$

$$= -\left\{ \{B, H\}, A \right\}_q - \left\{ \{H, A\}, B \right\}_q + \left\{ \frac{\partial A}{\partial t}, B \right\}_q + \left\{ A, \frac{\partial B}{\partial t} \right\}_q$$

$$= \underbrace{\left\{ \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t}, B \right\}}_{=0 \text{ n.V.}} - \underbrace{\left\{ \{B, H\} + \frac{\partial B}{\partial t}, A \right\}}_{=0 \text{ n.V.}} = 0$$

□

Beispiele: siehe unten/Übung.

Spezialfälle der Poisson-Klammer:

$$\{A, \vec{q}\} = \underbrace{\frac{\partial \vec{q}}{\partial \vec{p}}}_{=0} \frac{\partial A}{\partial \vec{q}} - \underbrace{\frac{\partial \vec{q}}{\partial \vec{q}}}_{=1} \frac{\partial A}{\partial \vec{p}} = - \frac{\partial A}{\partial \vec{p}}$$

$$\{A, \vec{p}\} = \frac{\partial \vec{p}}{\partial \vec{p}} \frac{\partial A}{\partial \vec{q}} - \frac{\partial \vec{p}}{\partial \vec{q}} \frac{\partial A}{\partial \vec{p}} = \frac{\partial A}{\partial \vec{q}}$$

Zuletzt noch die fundamentalen Poisson-Klammern:

$$\{q_a, q_e\} = 0, \quad \{p_a, p_e\} = 0; \quad \{q_a, p_e\} = \delta_{ae}$$

Die Poisson-Klammern sind eng mit dem Kommutator in der Quantenmechanik verknüpft.

8.5 Kanonische Transformationen

Transformationen im Lagrange-Formalismus, $L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t)$: Punkttransformationen $\vec{q} \rightarrow \vec{\bar{q}}(\vec{q}, t)$; lassen Struktur der Lagrange-Gleichungen invariant (falls Trafo genügend glatt).

Mehr Freiheiten im Hamilton-Formalismus: Eine Transformation $(\vec{q}, \vec{p}) \rightarrow (\vec{\bar{q}}, \vec{\bar{p}})$

$$\text{mit } \vec{\bar{q}} = \vec{\bar{q}}(\vec{q}, \vec{p}, t); \quad \vec{\bar{p}} = \vec{\bar{p}}(\vec{q}, \vec{p}, t)$$

heißt **kanonisch**, falls sie die Struktur der Hamilton-Gleichungen invariant läßt:

$$\dot{\vec{q}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}; \quad \dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{q}} \quad \rightarrow \quad \dot{\vec{\bar{q}}} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial \vec{\bar{p}}}; \quad \dot{\vec{\bar{p}}} = -\frac{\partial \bar{H}}{\partial \vec{\bar{q}}}$$

Neben dem ursprünglichen Variationsprinzip

$$\delta \tilde{S} = 0; \quad \tilde{S}_{(\vec{q}_1, t_1)}^{(\vec{q}_2, t_2)}[\vec{q}, \vec{p}] = \int_{t_1}^{t_2} dt \tilde{L}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, \vec{p}, t)$$

mit $\tilde{L} \equiv \vec{q} \cdot \dot{\vec{p}} - H(\vec{q}, \vec{p}, t)$ gilt daher auch $\delta \tilde{S} = 0$

(analoge Ausdrücke mit gestrichelten Größen). Achtung: Randbedingungen nicht äquivalent (siehe unten!).

Beispiele: a) Reskalierung der Impulsvariablen

$$\vec{\bar{q}} = \vec{q}, \quad \vec{\bar{p}} = \lambda^{-1} \vec{p}, \quad \bar{H}(\vec{\bar{q}}, \vec{\bar{p}}, t) = \lambda^{-1} H(\vec{q}, \lambda \vec{p}, t)$$

Die kanonische Struktur ist offensichtlich erhalten:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{H}}{\partial \vec{\bar{p}}} &= \lambda^{-1} \lambda \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} = \dot{\vec{q}} = \dot{\vec{\bar{q}}} \\ -\frac{\partial \bar{H}}{\partial \vec{\bar{q}}} &= -\lambda^{-1} \frac{\partial H}{\partial \vec{q}} = \lambda^{-1} \dot{\vec{p}} = \dot{\vec{\bar{p}}} \end{aligned}$$

Dagegen werden modifizierte Lagrange-Funktion und Wirkung reskaliert:

$$\bar{L} = \dot{\bar{q}} \cdot \bar{p} - \bar{H}(\bar{q}, \bar{p}, t) = \lambda^{-1} \tilde{L}; \quad \bar{S} = \lambda^{-1} \tilde{S}.$$

b) Eine wichtige Klasse von kanonischen Transformationen mit $\tilde{L} \neq \bar{L}$ bilden die **Berührungstransformationen**. Diese können z. B. **definiert** werden durch

$$\bar{L}(\bar{q}, \bar{p}, t) = \tilde{L}(\bar{q}, \bar{p}, t) + \frac{d}{dt} F_1(\bar{q}, \bar{q}, t) \quad (*)$$

$F_1(\bar{q}, \bar{q}, t)$: glatte Funktion von alten und neuen Koordinaten, ansonsten zunächst beliebig; „erzeugende Funktion“ der Berührungstrafo.

Letztlich sind nur 2 der 4 Vektoren $\bar{q}, \bar{p}, \bar{q}, \bar{p}$ unabhängig – wie werden die Beziehungen festgelegt?

* \leadsto

$$\dot{\bar{q}} \cdot \bar{p} - \bar{H}(\bar{q}, \bar{p}, t) = \dot{\bar{q}} \cdot \bar{p} - \bar{H}(\bar{q}, \bar{p}, t) + \frac{\partial F_1}{\partial \bar{q}} \dot{\bar{q}} + \frac{\partial F_1}{\partial \bar{q}} \dot{\bar{q}} + \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

$$\left(\bar{p} - \frac{\partial F_1}{\partial \bar{q}}\right) d\bar{q} - \left(\bar{p} + \frac{\partial F_1}{\partial \bar{q}}\right) \cdot d\bar{q} + \left(\bar{H} - H - \frac{\partial F_1}{\partial t}\right) dt = 0$$

Die Differentiale sind hier als unabhängig anzusehen \leadsto

$$\bar{p} = \frac{\partial F_1}{\partial \bar{q}}; \quad \bar{p} = -\frac{\partial F_1}{\partial \bar{q}}; \quad \bar{H} = H + \frac{\partial F_1}{\partial t}; \quad F_1 = F_1(\bar{q}, \bar{q}, t) \quad (\Delta)$$

Damit ist die Berührungstrafo $(\bar{q}, \bar{p}) \rightarrow (\bar{q}, \bar{p})$ eindeutig festgelegt,

falls $\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q} \partial \bar{q}} \neq 0$:

$$\vec{p} = \frac{\partial F}{\partial \dot{\vec{q}}}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) \rightsquigarrow \vec{q}(\vec{q}, \vec{p}, t)$$

$$\vec{p} = -\frac{\partial \bar{F}}{\partial \dot{\vec{q}}}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}(\vec{q}, \vec{p}, t), t)$$

Analog: Rücktransformation $(\vec{q}, \vec{p}) \rightarrow (\vec{q}, \dot{\vec{q}})$

Unter zusätzlichen Bedingungen (z.B. \bar{F} strikt konvex in $\dot{\vec{q}}$), ist auch das Auflösen nach anderen Variablenpaaren möglich, z.B. $(\vec{q}, \vec{p}) \rightarrow (\vec{q}, \dot{\vec{q}})$ (siehe Skript).

Noch zu zeigen: die Berührungstransformation γ, A ist kanonisch.

$$\tilde{S}_{(\vec{q}_1, t_1)}^{(\vec{q}_2, t_2)}[\vec{q}, \vec{p}] = \int_{t_1}^{t_2} dt [\dot{\vec{q}} \cdot \vec{p} - H(\vec{q}, \vec{p}, t)]$$

$$* = \int_{t_1}^{t_2} dt [\dot{\vec{q}} \cdot \vec{p} - \bar{H}(\vec{q}, \vec{p}, t)] + F_1(\vec{q}(t), \vec{q}(t), t) \Big|_{t_1}^{t_2}$$

Bei der Variation (mit $\delta \vec{q} = \varepsilon \vec{K}$, $\delta \vec{p} = \varepsilon \vec{\pi}$; $\delta \vec{q} = \varepsilon \vec{K}$,

$\delta \vec{p} = \varepsilon \vec{\pi}$) ist zu beachten, dass zwar $\vec{K}(t_1) = \vec{K}(t_2) = 0$ fest ist, aber \vec{K} am Rand variieren kann. Damit gilt:

$$\vec{0} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \delta \tilde{S}_{(\vec{q}_1, t_1)}^{(\vec{q}_2, t_2)}[\vec{q}, \vec{p}]$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\dot{\vec{q}} \cdot \vec{\pi} + \vec{p} \cdot \vec{K} - \frac{\partial \bar{H}}{\partial \dot{\vec{q}}} \cdot \vec{K} - \frac{\partial \bar{H}}{\partial \vec{p}} \cdot \vec{\pi} \right] + \frac{\partial F_1}{\partial \dot{\vec{q}}} \cdot \vec{K} \Big|_{t_1}^{t_2}$$

$$= \underbrace{\left(\vec{p} + \frac{\partial F_1}{\partial \dot{\vec{q}}} \right) \cdot \vec{K}}_{=0} \Big|_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\left(\dot{\vec{q}} - \frac{\partial \bar{H}}{\partial \vec{p}} \right) \cdot \vec{\pi} - \left(\vec{p} + \frac{\partial \bar{H}}{\partial \dot{\vec{q}}} \right) \cdot \vec{K} \right]$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\left(\dot{\bar{q}} - \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{p}} \right) \cdot \bar{\pi} - \left(\dot{\bar{p}} + \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{q}} \right) \cdot \bar{K} \right]$$

Dies kann nur für alle Variationen gelten, falls

$$\dot{\bar{q}} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{p}} ; \quad \dot{\bar{p}} = - \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{q}}$$

Aus den kanonischen Bewegungsgleichungen in den ursprünglichen Koordinaten folgen also kan. B.-Gl. in den neuen Koordinaten. \square

Beachte: die totale Zeitableitung trug hier wesentlich zur Variation der Wirkung bei (durch Elimination eines zweiten Randterms).

Beispiel: $F_1(\bar{q}, \bar{q}, t) = -\bar{q} \cdot \bar{q}$

$$\rightarrow \bar{p} = \frac{\partial F_1}{\partial \bar{q}} = -\bar{q}; \quad \bar{p} = -\frac{\partial F_1}{\partial \bar{q}} = \bar{q}$$

d.h. $(\bar{q}, \bar{p}) \rightarrow (\bar{q}, \bar{p}) = (-\bar{p}, \bar{q})$

Durch die Transformation werden also die Rollen von „Koordinaten“ und „Impulsen“ vertauscht.

I.A. gehen also bei kanonischen Transformationen die Konvexität der Hamilton-Funktion als Funktion der Impulse und die Dualität zu einer Lagrange-Funktion verloren.

15.12.08

Theorie II: Vorlesung 18

8.5.1 Alternative Formulierungen der Berührungstransformation

Bisher haben wir erzeugende Funktionen $F_1(\vec{q}, \vec{q}, t)$ betrachtet, die also nur von alten und neuen **Koordinaten** abhängen. Jedoch sind alternativ auch Abhängigkeiten von alten oder neuen **Impulsen** möglich:

	\vec{q}	\vec{p}
\vec{q}	$F_1(\vec{q}, \vec{q}, t)$	$F_2(\vec{q}, \vec{p}, t)$
\vec{p}	$F_3(\vec{p}, \vec{q}, t)$	$F_4(\vec{p}, \vec{p}, t)$

Dabei lauten die Transformationsgleichungen:

$\vec{p} = \frac{\partial F_1}{\partial \vec{q}}$			$\vec{p} = -\frac{\partial F_1}{\partial \vec{q}}$
$\vec{p} = \frac{\partial F_2}{\partial \vec{q}}$		$\vec{q} = \frac{\partial F_2}{\partial \vec{p}}$	
	$\vec{q} = -\frac{\partial F_3}{\partial \vec{p}}$		$\vec{p} = -\frac{\partial F_3}{\partial \vec{q}}$
	$\vec{q} = -\frac{\partial F_4}{\partial \vec{p}}$	$\vec{q} = \frac{\partial F_4}{\partial \vec{p}}$	

$$\bar{H} - H = \frac{\partial F_n}{\partial t}$$

Formal sind die erzeugenden Funktionen durch Legendre-Transformationen miteinander verknüpfbar. z.B. können wir $F_2(\vec{q}, \vec{p}, t)$ als Legendre-Transformierte von $-F_1(\vec{q}, \vec{q}, t)$

bezüglich der neuen Koordinaten/Impulse einführen:

$$F_2(\vec{q}, \vec{p}, t) = \vec{p} \cdot \vec{q}_m(\vec{q}, \vec{p}, t) - [-F_1(\vec{q}, \vec{q}_m(\vec{q}, \vec{p}, t), t)]$$

↑ negatives Vorzeichen wegen $\vec{p} = -\frac{\partial F_1}{\partial \vec{q}}$

$$\left(0 = \frac{\partial F_2(\vec{q}, \vec{q}_m, \vec{p}, t)}{\partial \vec{q}} = \vec{p} + \frac{\partial F_1}{\partial \vec{q}} \quad \text{ok.} \right)$$

$$\vec{p} = \frac{\partial F_2}{\partial \vec{q}}(\vec{q}, \vec{q}_m, \vec{p}, t) = -\frac{\partial(-F_1)}{\partial \vec{q}} = \frac{\partial F_1}{\partial \vec{q}} \quad (\text{Legendre-Transform mit Dummy-V.})$$

$$\left. \frac{\partial F_2}{\partial \vec{p}} \right|_{\vec{q}_{\text{const}}} = \vec{q}_m + \vec{p} \cdot \frac{\partial \vec{q}_m}{\partial \vec{p}} + \frac{\partial F_1}{\partial \vec{q}} \frac{\partial \vec{q}_m}{\partial \vec{p}} = \vec{q}$$

Beachte: In der Praxis sind die erzeugenden Funktionen oft nicht strikt konvex und können dann nicht durch Legendre-Transformierte ersetzt werden.

Beispiele:

a) Vertauschung von Ort und Impuls $(\vec{q}, \vec{p}) \rightarrow (\vec{q}, \vec{p}) = (-\vec{p}, \vec{q})$

$$(i) F_1(\vec{q}, \vec{q}, t) = -\vec{q} \cdot \vec{q} \quad (ii) F_4(\vec{p}, \vec{p}, t) = -\vec{p} \cdot \vec{p}$$

b) Identität $(\vec{q}, \vec{p}) \rightarrow (\vec{q}, \vec{p}) = (\vec{q}, \vec{p})$

$$(i) F_2(\vec{q}, \vec{p}, t) = \vec{q} \cdot \vec{p} \quad (ii) F_3(\vec{p}, \vec{q}, t) = -\vec{p} \cdot \vec{q}$$

$$c) F_2(\vec{q}, \vec{p}, t) = (\vec{q} + \frac{\alpha}{2} \vec{p}) \cdot \vec{p}$$

$$\vec{p} = \frac{\partial F_2}{\partial \vec{q}} = \vec{p}; \quad \vec{q} = \frac{\partial F_2}{\partial \vec{p}} = \vec{q} + \alpha \vec{p} = \vec{q} + \alpha \vec{p}$$

(8.5.2 Berührungstransformationen als Gruppe)

8.5.3 Infinitesimale Berührungstransformationen

Betrachte Berührungstransformationen nahe der Identität, die durch

$$F_2(\vec{q}, \vec{p}, t) = \vec{q} \cdot \vec{p} + \varepsilon f_2(\vec{q}, \vec{p}, t), \quad \varepsilon \text{ „klein“, } f_2 \text{ fest}$$

erzeugt werden. Die Trafo-Gleichungen lauten dann:

$$\vec{p} = \frac{\partial F_2}{\partial \vec{q}} = \vec{p} + \varepsilon \frac{\partial f_2}{\partial \vec{q}}(\vec{q}, \vec{p}, t) = \vec{p} + \varepsilon \frac{\partial f_2}{\partial \vec{q}}(\vec{q}, \vec{p}, t) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

$$\vec{q} = \frac{\partial F_2}{\partial \vec{p}} = \vec{q} + \varepsilon \frac{\partial f_2}{\partial \vec{p}}(\vec{q}, \vec{p}, t) = \vec{q} + \varepsilon \frac{\partial f_2}{\partial \vec{p}}(\vec{q}, \vec{p}, t) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

$$\bar{H} - H = \frac{\partial F_2}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial f_2}{\partial t}(\vec{q}, \vec{p}, t) = \varepsilon \frac{\partial f_2}{\partial t}(\vec{q}, \vec{p}, t) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

In führender Ordnung kann f_2 also als normale Funktion der (alten) Koordinaten und Impulse betrachtet werden.

Man erhält für die Variationen von (\vec{q}, \vec{p}) und H :

$$\delta \vec{q} \equiv \vec{q} - \vec{q} = \varepsilon \frac{\partial f_2}{\partial \vec{p}}(\vec{q}, \vec{p}, t); \quad \delta \vec{p} \equiv \vec{p} - \vec{p} = -\varepsilon \frac{\partial f_2}{\partial \vec{q}}(\vec{q}, \vec{p}, t) \quad (*)$$

$$\bar{H} - H = \varepsilon \frac{\partial f_2}{\partial t}(\vec{q}, \vec{p}, t) \quad (**)$$

Auch f_2 wird als erzeugende Funktion bezeichnet.

Als Verallgemeinerung von $*$ betrachten wir Variationen δG von Observablen $G(\vec{q}, \vec{p}, t)$:

$$\delta G \equiv G(\vec{q}, \vec{p}, t) - G(\vec{q}, \vec{p}, t)$$

$$= \frac{\partial G}{\partial \vec{q}} \cdot \delta \vec{q} + \frac{\partial G}{\partial \vec{p}} \cdot \delta \vec{p} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

$$= \varepsilon \left(\frac{\partial G}{\partial \vec{q}} \frac{\partial f_2}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial G}{\partial \vec{p}} \frac{\partial f_2}{\partial \vec{q}} \right) = \varepsilon \{G, f_2\} \quad (A)$$

Die von f_2 induzierte infinitesimale Variation von G wird also durch die Poisson-Klammer $\{G, f_2\}$ bestimmt.

Speziell betrachten wir nun B' -trafos, die die Form der Hamilton-Funktion invariant lassen:

$$\bar{H}(\bar{q}, \bar{p}, t) = H(\bar{q}, \bar{p}, t) \quad (\square)$$

Dann gilt:

$$\varepsilon \frac{\partial f_2}{\partial t}(\bar{q}, \bar{p}, t) \stackrel{**}{=} \bar{H}(\bar{q}, \bar{p}, t) - H(\bar{q}, \bar{p}, t)$$

$$\stackrel{\square}{=} H(\bar{q}, \bar{p}, t) - H(\bar{q}, \bar{p}, t) = \delta H$$

$$\stackrel{\triangle}{=} \varepsilon \{H, f_2\} = -\varepsilon \{f_2, H\}$$

Folglich muss f_2 ein Integral der Bewegung sein:

$$\frac{d}{dt} f_2 = \{f_2, H\} + \frac{\partial f_2}{\partial t} = 0$$

Dieser Schluss lässt sich auch umkehren: Observablen $f_2(\bar{q}, \bar{p}, t)$, die unter der (durch H definierten Bewegung) erhalten sind, erzeugen B' -trafos, die die Form von H invariant lassen.

Beispiel: Translationen

Translationen werden durch die Funktion

$$F_2(\bar{q}, \bar{p}) = \bar{q} \cdot \bar{p} + \bar{\alpha} \cdot \bar{p} = (\bar{q} + \bar{\alpha}) \cdot \bar{p}$$

erzeugt: $\bar{p} = \frac{\partial F_2}{\partial \bar{q}} = \bar{p}, \quad \bar{q} = \frac{\partial F_2}{\partial \bar{p}} = \bar{q} + \bar{\alpha}$

Insbesondere gilt mit $\bar{\alpha} = \varepsilon \hat{\alpha}$: $f_2(\bar{q}, \bar{p}) = \hat{\alpha} \cdot \bar{p}$

Falls die Hamilton-Funktion nun forminvariant unter Translationen in $\vec{\alpha}$ -Richtung ist (also nicht von $\vec{\alpha} \cdot \vec{q}$ abhängt), so dass $H(\vec{q}, \vec{p}) = \bar{H}(\vec{q}, \vec{p}) = H(\vec{q}, \vec{p})$,

muss die Observable $\vec{\alpha} \cdot \vec{p}$ erhalten sein.

Wir haben also einen Spezialfall des Noether-Theorems reproduziert.

Beispiel: Zeitentwicklung

Eine wichtige Anwendung ist die **Zeitentwicklung**, die mit Hilfe der erzeugenden Funktion

$$f_2(\vec{q}, \vec{p}, t) = H(\vec{q}, \vec{p}, t)$$

beschrieben werden kann. Hier entspricht der kleine Parameter dem infinitesimalen Zeitschritt: $\epsilon \equiv \delta t$

$$* \rightsquigarrow \delta \vec{q} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}(\vec{q}, \vec{p}, t) \delta t = \dot{\vec{q}} \delta t; \delta \vec{p} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{q}}(\vec{q}, \vec{p}, t) \delta t = \dot{\vec{p}} \delta t$$

Die durch H erzeugte Berührungstransformation bildet also den Punkt $(\vec{q}_q(t), \vec{p}_q(t))$ im Phasenraum auf den Punkt $(\vec{q}_q(t + \delta t), \vec{p}_q(t + \delta t))$ ab: auch die **infinitesimale**

Zeitentwicklung lässt sich als kanonische Transformation auffassen!

Da/falls $H(\vec{q}, \vec{p}, t)$ strikt konvex in \vec{p} ist, können wir auch Legendre-transformieren: mit

$$F_2(\vec{q}, \vec{p}, t) = \vec{q} \cdot \vec{p} + \epsilon f_2(\vec{q}, \vec{p}, t) = \vec{q} \cdot \vec{p} + H(\vec{q}, \vec{p}, t) \delta t$$

gilt:

$$\begin{aligned}
F_1(\vec{q}, \vec{q}, t) &= F_2(\vec{q}, \vec{p}, t) - \vec{p} \cdot \vec{q} = \vec{p} \cdot (\dot{\vec{q}} - \vec{q}) + H(\vec{q}, \vec{p}, t) \delta t \\
&= -\vec{p} \cdot \delta \vec{q} + H(\vec{q}, \vec{p}, t) \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2) \\
&= -[\vec{p} \cdot \dot{\vec{q}} - H(\vec{q}, \vec{p}, t)] \delta t = -L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) \delta t
\end{aligned}$$

Damit lässt sich auch eine **endliche** Transformation konstruieren, die den Startpunkt \vec{q}_1 innerhalb des endlichen Intervalls $t_2 - t_1$ auf \vec{q}_2 abbildet:

$$F_1(\vec{q}_1, \vec{q}_2, t_1, t_2) = - \int_{t_1}^{t_2} dt L(\vec{q}_q(t), \dot{\vec{q}}_q(t), t) = - \sum_{(\vec{q}_1, t_1)}^{(\vec{q}_2, t_2)} [\vec{q}, \dot{\vec{q}}]$$

Die Wirkung $\Sigma \equiv S$ entlang der physikalischen Bahn lässt sich also als Erzeugende der physikalischen Bewegung interpretieren \leadsto **Hamilton-Jacobi-Theorie**.

Frohe Weihnachten!

17.12.08

Theorie II: Vorlesung 19

Notiztitel

05.01.2009

(Kurz wiederholung Hamilton-Formalismus)

8.3.1* Die Hamilton-Jacobi-Gleichung

Bisher: a) Lagrange-Gleichungen $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} =$

System von f gewöhnlichen DGL 2. Ordnung
(äquivalent $2f$ DGL 1. Ordnung)

b) Hamilton-Gleichungen $\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}; \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$

System von $2f$ gewöhnlichen DGL 1. Ordnung

Alternativer Ansatz: Hamilton-Jacobi-Gleichung (HJG)

1 partielle DGL

Bei dem Hamilton-Jacobi-Formalismus handelt es sich um eine Variante des Hamilton-Zugangs, in der das Problem auf das Finden einer optimalen kanonischen Transformation verlagert wird.

Erinnerung: kanonische Transformation: $(\vec{q}, \vec{p}) \rightarrow (\vec{\bar{q}}, \vec{\bar{p}}), H \rightarrow \bar{H}$

$$\dot{\vec{q}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}, \dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{q}} \rightarrow \dot{\vec{\bar{q}}} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial \vec{\bar{p}}}, \dot{\vec{\bar{p}}} = -\frac{\partial \bar{H}}{\partial \vec{\bar{q}}}$$

Sinn einer solchen Transformation ist i. d. die Vereinfachung der Hamilton-Gleichungen.

Frage: Was sind die denkbar einfachsten H-Gleichungen?

Antwort: $\bar{H} = 0 \Rightarrow \dot{\bar{p}} = 0, \dot{\bar{q}} = 0$

$\bar{p} \equiv \vec{\alpha}$ konstant, $\bar{q} = \vec{\beta}$ konstant

Betrachte nun erzeugende Funktionen $F_2(\bar{q}, \bar{p}, t)$ (vgl. 8.5.1)

Forderung: $\bar{H} = H(\bar{q}, \bar{p}, t) + \frac{\partial F_2}{\partial t}(\bar{q}, \bar{p}, t) = 0$

andererseits gilt: $\bar{p} = \frac{\partial F_2}{\partial \bar{q}}(\bar{q}, \bar{p}, t)$ (und $\bar{q} = \frac{\partial F_2}{\partial \bar{p}}$)

Notation: $F_2(\bar{q}, \bar{p}, t) \equiv S^*(\bar{q}, t; \vec{\alpha})$ (analog Scheck, 2.35)
Konstanter Parameter

Damit erhalten wir die Bestimmungsgleichung:

$$\bar{H} = H\left(\bar{q}, \frac{\partial S^*(\bar{q}, t; \vec{\alpha})}{\partial \bar{q}}, t\right) + \frac{\partial S^*(\bar{q}, t; \vec{\alpha})}{\partial t} = 0$$

Hamilton-Jacobi-Gleichung

Vorgehen im Hamilton-Jacobi-Formalismus

(i) Lösen der HJ-Gleichung

(ii) Berechnung der Bahnen $\bar{q}(t; \vec{\alpha}, \vec{\beta})$ aus

$$\bar{q} = \frac{\partial S^*}{\partial \vec{\alpha}}(\bar{q}, t; \vec{\alpha}) = \vec{\beta}$$

Die Auflösung ist eindeutig, falls

$$\det \frac{\partial^2 S^*(\bar{q}, t; \vec{\alpha})}{\partial \vec{\alpha} \partial \bar{q}} = 0$$

Dann heisst S^* vollständige Lösung der HJG.

Wichtiger Spezialfall: für Hamilton-Funktionen $H(\vec{q}, \vec{p})$ ohne explizite Zeitabhängigkeit kann man S^* separieren (wegen $H(\vec{q}, \vec{p}) = E$ konstant entlang Bahnen):

$$S^*(\vec{q}; t; \vec{\alpha}) = S(\vec{q}; \vec{\alpha}) - Et$$

Damit lautet die verkürzte Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$H\left(\vec{q}, \frac{\partial S(\vec{q}; \vec{\alpha})}{\partial \vec{q}}\right) = E$$

Beispiele / Anwendungen:

a) freies Teilchen: $H = \frac{\vec{p}^2}{2m}$

→ allgemeine HJG: $\frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S^*(\vec{x}, t; \vec{\alpha}))^2 + \frac{\partial S^*}{\partial t} = 0$

Diese wird offensichtlich gelöst durch

$$S^*(\vec{x}, t; \vec{\alpha}) = \vec{\alpha} \cdot \vec{x} - \frac{\alpha^2}{2m} t + c$$

(allg. Herleitung aus Separationsansatz; siehe unten).

denn $\vec{\nabla} S^* = \vec{\alpha}$, $\frac{\partial S^*}{\partial t} = -\frac{\alpha^2}{2m} = -E$

In diesem Fall ist also $\vec{p} = \vec{\alpha} = \vec{p}$

Die Bahnkurve erhält man aus

$$\vec{\beta} = \frac{\partial S^*(\vec{x}, t; \vec{\alpha})}{\partial \vec{\alpha}} = \vec{x} - \frac{\vec{\alpha}}{m} t$$

$$\Rightarrow \vec{x}(t; \vec{\alpha}, \vec{\beta}) = \vec{\beta} + \frac{\vec{\alpha}}{m} t, \quad \vec{p}(t; \vec{\alpha}) = \vec{\alpha}$$

b) Teilchen im Schwerfeld

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + mgx_3 = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{p_3^2}{2m} + mgx_3 = H_1 + H_2 + H_3$$

$$\frac{(\vec{\nabla} S)^2}{2m} + mgx_3 + \frac{\partial S^*}{\partial t} = 0$$

Separationsansatz $S^*(\vec{x}, t; \vec{\alpha}) = S_1^*(x_1, t; \alpha_1) + S_2^*(x_2, t; \alpha_2) + S_3^*(x_3, t; \alpha_3)$

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S_{1/2}^*}{\partial x_{1/2}} \right)^2 + \frac{\partial S_{1/2}^*}{\partial t} = 0; \quad \frac{1}{2m} (S'(x_{1/2}))^2 = E_{1/2}$$

$$\Rightarrow S'(x_{1/2}) = \sqrt{2mE_{1/2}} \Rightarrow S(x_{1/2}) = \underbrace{\sqrt{2mE_{1/2}}}_{=\alpha_{1/2}} x_{1/2} + C_{1/2}$$

$$\Rightarrow S_{1/2} = \alpha_{1/2} x_{1/2} - \frac{\alpha_{1/2}^2}{2m} t$$

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S_3^*}{\partial x_3} \right)^2 + mgx_3 + \frac{\partial S_3^*}{\partial t} = 0$$

verkürzte Wirkung: $\frac{1}{2m} (S_3')^2 + mgx_3 = E_3$
 $= \frac{d}{dx} S_3(x_3; \alpha_3)$

$$S_3'(x_3) = \sqrt{2m(E_3 - mgx_3)}$$

$$S_3(x_3) = \sqrt{2m} (E_3 - mgx_3)^{3/2} \left[\frac{3}{2} (-mg) \right]^{-1} + c$$

$$S_3^*(x_3, t) = -\sqrt{\frac{2}{m}} \frac{2}{3g} [E_3 - mgx_3]^{3/2} - E_3 t$$

Wähle $\alpha_3 \equiv E_3$:

$$\Rightarrow \beta_3 = \frac{\partial S_3^*}{\partial \alpha_3} = \frac{\partial S_3^*}{\partial E_3} = -\sqrt{\frac{2}{m}} \frac{1}{g} [E_3 - mgx_3]^{1/2} - t$$

|||
-t₀

$$\Rightarrow [E_3 - mgx_3]^{1/2} = -\sqrt{\frac{m}{2}} g (t - t_0)$$

$$E_3 - mgx_3 = \frac{m}{2}g^2(t-t_0)^2$$

$$x_3(t) = \frac{E_3}{mg} - \frac{g}{2}(t-t_0)^2$$

c) Allgemeiner eindimensionaler Fall

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x); \quad V(x) \text{ beliebig}$$

→ verkürzte Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{d}{dx} S(x; \alpha) \right)^2 + V(x) = E \quad (\equiv E\alpha)$$

Wähle nun $\alpha = E$:

$$\frac{d}{dx} S(x; E) = \sqrt{2m(E - V(x))}$$

$$S(x; E) = \int_{x_0}^x \sqrt{2m(E - V(x'))} dx'$$

$$S^*(x, t; E) = \int_{x_0}^x \sqrt{2m(E - V(x'))} dx' - Et$$

Die Bahn $x(t)$ folgt nun aus

$$\beta \stackrel{||}{=} \underset{-t_0}{=} \frac{\partial S^*}{\partial \alpha}(x, t; \alpha) = \frac{\partial S^*}{\partial E}(x, t; E) = \underbrace{\int_{x_0}^x \frac{\sqrt{2m}}{2} \frac{dx'}{\sqrt{E - V(x')}}}_{f(x; E, x_0)} - t$$

$$f(x) = t_0 + \int_{x_0}^x \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{dx'}{\sqrt{E - V(x')}}$$

durch Lösen des Integrals und Invertierung.

5.1.09

Theorie II: Vorlesung 20

Notiztitel

06.01.2009

Nachtrag: im Hamilton-Jacobi-Formalismus hatten wir für den 1-dimensionalen Fall $\alpha (= \bar{p}) = E$ gewählt.

Allgemeiner können wir setzen: $E = f(\alpha)$

$$\Rightarrow \beta = \frac{\partial S^*}{\partial \alpha} = \frac{\partial S}{\partial E} f'(\alpha) - f'(\alpha)t$$

$$\Leftrightarrow \tilde{\beta} = \frac{\partial S}{\partial E} - t \quad (\text{mit } \beta = \frac{\beta}{f'(\alpha)})$$

Die Bestimmungsgleichung für die Bahn $q(t)$ ist also identisch, bis auf eine Reskalierung $\beta \rightarrow \tilde{\beta}$ der zweiten Konstanten – solange $f'(\alpha) \neq 0$!

Beachte: $S^*(\vec{q}, t; \vec{\alpha})$ entspricht einer **Wirkung** mit freiem Endpunkt

$$\begin{aligned} \frac{dS^*}{dt}(\vec{q}, t; \vec{\alpha}) &= \frac{\partial S^*}{\partial \vec{q}}(\vec{q}, t; \vec{\alpha}) \cdot \dot{\vec{q}} + \frac{\partial S^*}{\partial t} \Big|_{\phi} \\ &= \vec{p}_{\phi} \cdot \dot{\vec{q}} - H(\vec{q}, \vec{p}, t) \\ &= \tilde{L}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, \vec{p}, t) \stackrel{(\text{vgl. 8.3})}{=} L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow S^*(\vec{q}, t; \vec{\alpha}) &= \int_{t_0}^t \tilde{L}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, \vec{p}, t') dt' + S_0 \\ &= S_0 + \int_{(\vec{q}_0, t_0)}^{\vec{q}(t)} [\vec{q}, \vec{p}] \Big|_{\phi} \end{aligned}$$

Bsp: freies Teilchen: $S^* = \vec{\alpha} \cdot \vec{x} - \frac{\alpha^2}{2m} t + C$

$$\frac{d}{dt} S^* = \vec{\nabla} S^* \cdot \dot{\vec{x}} + \frac{\partial S^*}{\partial t} = \vec{\alpha} \cdot \dot{\vec{x}} - \frac{\alpha^2}{2m} = \vec{p} \cdot \dot{\vec{x}} - \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2 = T = L$$

8.6 Kanonische Transformationen und Poisson-Klammern

Schon gezeigt (Anfang 8.4): Die Poisson-Klammer zweier Erhaltungsgrößen ist Erhaltungsgröße, d.h. invariant unter der Zeiterolution, einer Berührungstransformation (8.5).

Jetzt Verallgemeinerung: jede Poisson-Klammer ist invariant unter beliebigen Berührungstransformationen.

Zur Untersuchung des Transformationsverhaltens der Poisson-Klammer unter kanonischen Trafos $(\vec{q}, \vec{p}) \rightarrow (\vec{q}, \vec{p})$ müssen wir spezifizieren, nach welchen Variablen jeweils abgeleitet werden soll:

$$\{A, B\}_{\vec{q}, \vec{p}} = \frac{\partial A}{\partial \vec{q}} \cdot \frac{\partial B}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial A}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial B}{\partial \vec{q}}; \quad \{A, B\}_{\vec{q}, \vec{p}} = \frac{\partial A}{\partial \vec{q}} \cdot \frac{\partial B}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial A}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial B}{\partial \vec{q}}$$

Wir betrachten zunächst die fundamentalen Poisson-Klammern, d.h. für $A, B \in [\vec{p}, \vec{q}]$ ← Ersatz-Mengensymbol

Diese sind sicher nicht unter beliebigen kanonischen Trafos invariant, da z.B. bei der Reskalierung der Impulse $(\vec{q}, \vec{p}) \rightarrow (\vec{q}, \vec{p}) = (\vec{q}, \lambda^{-1} \vec{p})$ (mit $\lambda \neq 1$) gilt:

$$\begin{aligned} \{q_a, p_e\}_{\vec{q}, \vec{p}} &= \{q_a, \lambda^{-1} p_e\}_{\vec{q}, \vec{p}} = \lambda^{-1} \{q_a, p_e\}_{\vec{q}, \vec{p}} = \lambda^{-1} \delta_{ee} \\ &= \lambda^{-1} \{q_a, p_e\}_{\vec{q}, \vec{p}} \neq \{q_a, p_e\}_{\vec{q}, \vec{p}} \end{aligned}$$

Wir konzentrieren uns also im Folgenden auf Berührungstransformationen und berechnen die Poisson-Klammern der neuen Variablen in der alten Basis:

$$\{\vec{q}, \vec{q}\}_{\vec{q}, \vec{p}} = \frac{\partial \vec{q}}{\partial \vec{q}} \left(\frac{\partial \vec{q}}{\partial \vec{p}} \right)^T - \frac{\partial \vec{q}}{\partial \vec{p}} \left(\frac{\partial \vec{q}}{\partial \vec{q}} \right)^T \quad \text{schief-symmetrisch!}$$

$$\{\bar{q}, \bar{p}\}_{\bar{q}, \bar{p}} = \frac{\partial \bar{q}}{\partial \bar{q}} \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{p}} \right)^T - \frac{\partial \bar{q}}{\partial \bar{p}} \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{q}} \right)^T$$

$$\{\bar{p}, \bar{p}\}_{\bar{q}, \bar{p}} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{q}} \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{p}} \right)^T - \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{p}} \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{q}} \right)^T \quad \text{schief-symmetrisch!}$$

↑ Matrix mit Elementen $\{\bar{p}_a, \bar{p}_b\}_{\bar{q}, \bar{p}}$

Konkret wählen wir als erzeugende Funktion $F_1(\bar{q}, \bar{q}, t)$:

$$\leadsto \bar{p} = \frac{\partial F_1}{\partial \bar{q}} \quad (*) \quad \bar{p} = -\frac{\partial F_1}{\partial \bar{q}} \quad (\Delta)$$

Ableiten von $*$ nach \bar{q} bzw. \bar{p} liefert:

$$\phi_{\dagger} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{q}} = \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} + \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q} \partial \bar{q}} \frac{\partial \bar{q}}{\partial \bar{q}}; \quad \mathbb{1}_{\dagger} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{p}} = \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q} \partial \bar{q}} \frac{\partial \bar{q}}{\partial \bar{p}}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \bar{q}}{\partial \bar{q}} = - \left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q} \partial \bar{q}} \right)^{-1} \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2}; \quad \frac{\partial \bar{q}}{\partial \bar{p}} = \left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q} \partial \bar{q}} \right)^{-1}$$

$$\left[\text{Konvention: } \left(\frac{\partial \bar{a}}{\partial \bar{b}} \right)_{ij} = \frac{\partial a_i}{\partial b_j}; \quad \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \bar{a} \partial \bar{b}} \right)_{ij} = \frac{\partial^2 F}{\partial a_i \partial b_j} \right]$$

Entsprechend erhalten wir aus den Ableitungen von Δ :

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{q}} = - \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q} \partial \bar{q}} - \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q} \partial \bar{q}} \frac{\partial \bar{q}}{\partial \bar{q}} = - \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q} \partial \bar{q}} + \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q} \partial \bar{q}} \right)^{-1} \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2}$$

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{p}} = - \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \frac{\partial \bar{q}}{\partial \bar{p}} = - \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q} \partial \bar{q}} \right)^{-1}$$

Damit folgt für die Poisson-Klammern:

$$\{\bar{q}, \bar{q}\}_{\bar{q}, \bar{p}} = - \left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q} \partial \bar{q}} \right)^{-1} \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q} \partial \bar{q}} \right)^{-1}$$

Transponieren
nicht vergessen!

$$\text{symm. Matrix!} \quad \text{wegen } (A^{-1})^T = (A^T)^{-1} \quad - \left[- \left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q} \partial \bar{q}} \right)^{-1} \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q} \partial \bar{q}} \right)^{-1} \right] = \phi_{\dagger}$$

$$\{\bar{p}_i, \bar{p}_j\}_{\bar{q}_i, \bar{p}} = \left[-\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^i \partial \bar{q}^j} + \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^i \partial \bar{q}^j} \right)^{-1} \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \right] \left(-\left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^i \partial \bar{q}^j} \right)^{-1} \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \right) - \left[\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^i \partial \bar{q}^j} \right)^{-1} \right] \left[-\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^i \partial \bar{q}^j} + \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^i \partial \bar{q}^j} \right)^{-1} \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \right]$$

$$= \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} - \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^i \partial \bar{q}^j} \right)^{-1} \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^i \partial \bar{q}^j} \right)^{-1} \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} - \left[\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} - \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^i \partial \bar{q}^j} \right)^{-1} \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^i \partial \bar{q}^j} \right)^{-1} \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \right] = 0_f$$

$$\{\bar{q}_i, \bar{p}_j\}_{\bar{q}_i, \bar{p}} = \left[-\left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^i \partial \bar{q}^j} \right)^{-1} \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \right] \left[-\left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^i \partial \bar{q}^j} \right)^{-1} \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \right] - \left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^i \partial \bar{q}^j} \right)^{-1} \left[-\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^i \partial \bar{q}^j} + \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^i \partial \bar{q}^j} \right)^{-1} \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} \right] = \left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^i \partial \bar{q}^j} \right)^{-1} \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} = \mathbb{1}_f$$

Insgesamt gilt also:

$$\{\bar{q}_i, \bar{q}_j\}_{\bar{q}_i, \bar{p}} = 0_f; \quad \{\bar{p}_i, \bar{p}_j\}_{\bar{q}_i, \bar{p}} = 0_f; \quad \{\bar{q}_i, \bar{p}_j\}_{\bar{q}_i, \bar{p}} = \mathbb{1}_f$$

Da natürlich auch gilt

$$\{\bar{q}_i, \bar{q}_j\}_{\bar{q}_i, \bar{p}} = 0_f; \quad \{\bar{p}_i, \bar{p}_j\}_{\bar{q}_i, \bar{p}} = 0_f; \quad \{\bar{q}_i, \bar{p}_j\}_{\bar{q}_i, \bar{p}} = \mathbb{1}_f$$

sind die fundamentalen Poisson-Klammern also invariant unter beliebigen Berührungstransformationen! (analog zu beweisen für Erzeuger F_2, F_3, F_4) \square

Jetzt allgemeiner: definiert man für 2 Observablen

$$\bar{A}(\bar{q}, \bar{p}, t) \equiv A(\bar{q}(\bar{q}, \bar{p}, t), \bar{p}(\bar{q}, \bar{p}, t), t)$$

$$\bar{B}(\bar{q}, \bar{p}, t) \equiv B(\bar{q}(\bar{q}, \bar{p}, t), \bar{p}(\bar{q}, \bar{p}, t), t)$$

so gilt: $\{A, B\}_{\bar{q}, \bar{p}} = \{\bar{A}, \bar{B}\}_{\bar{q}, \bar{p}}$

d.h. auch die allgemeine Poisson-Klammer ist invariant unter beliebigen Berührungstrafos.

Beweis: Übung (Aufg. 33)

Wichtig: analoge Aussagen gelten in der Quantenmechanik für den Kommutator.

8.7 Schlussbemerkungen

Das **Liouville-Theorem** ist u.a. wichtig für die **Chaos-Theorie** und soll daher kurz qualitativ behandelt werden.

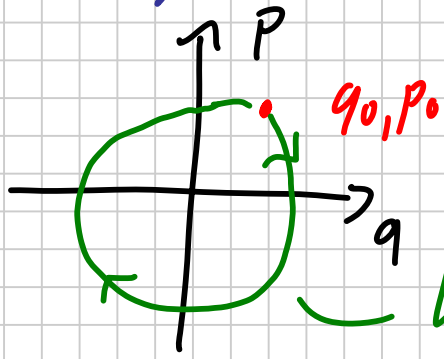
Determinismus: Im Rahmen der klassischen Mechanik ist die Zeitentwicklung eines Systems für alle Zeiten durch die Anfangsbedingungen bestimmt:

$$\vec{q}_0 = \vec{q}(0), \vec{v}_0 = \dot{\vec{q}}(0) \rightarrow \vec{q}(t), \dot{\vec{q}}(t) \quad \forall t$$

bzw. $\vec{q}_0 = \vec{q}(0), \vec{p}_0 = \vec{p}(0) \rightarrow \vec{q}(t), \vec{p}(t) \quad \forall t$

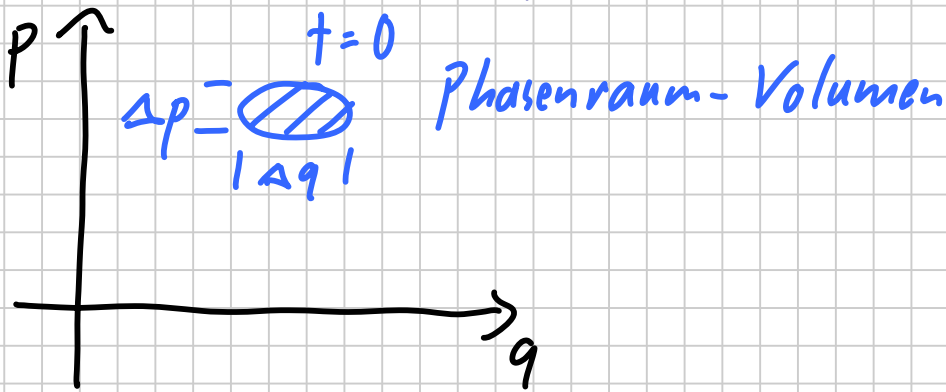
Frage: wie wirken sich Unbestimmtheiten in den Anfangsbedingungen aus?

Darstellung im Phasenraum (2 dim. Schnitt):



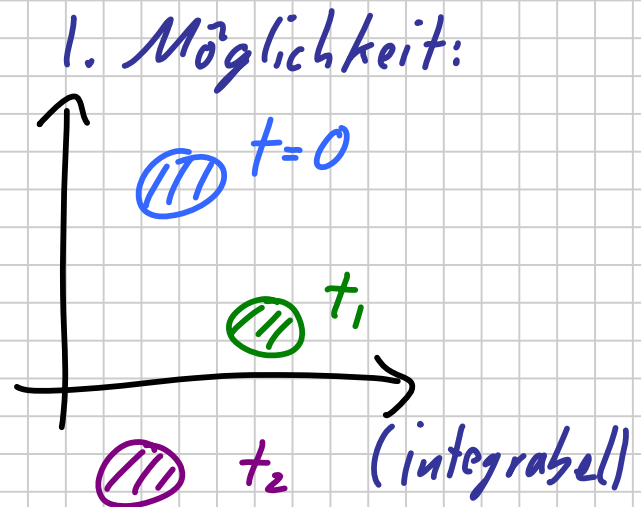
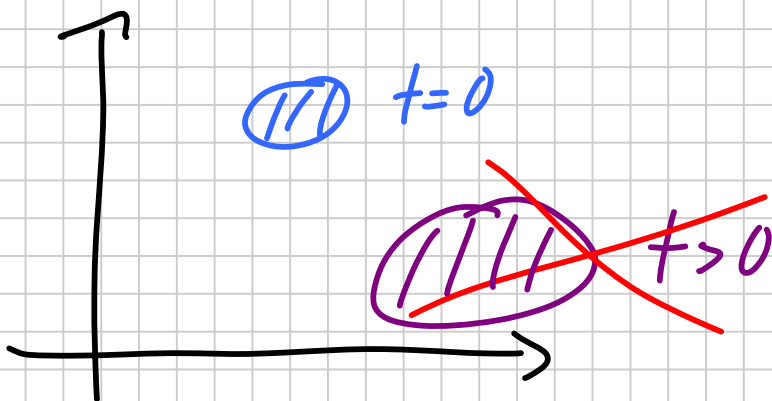
harm. Oszillator: Zeitevolution ist Ellipse

Unsicherheit in Anfangsbedingungen / Ensemble

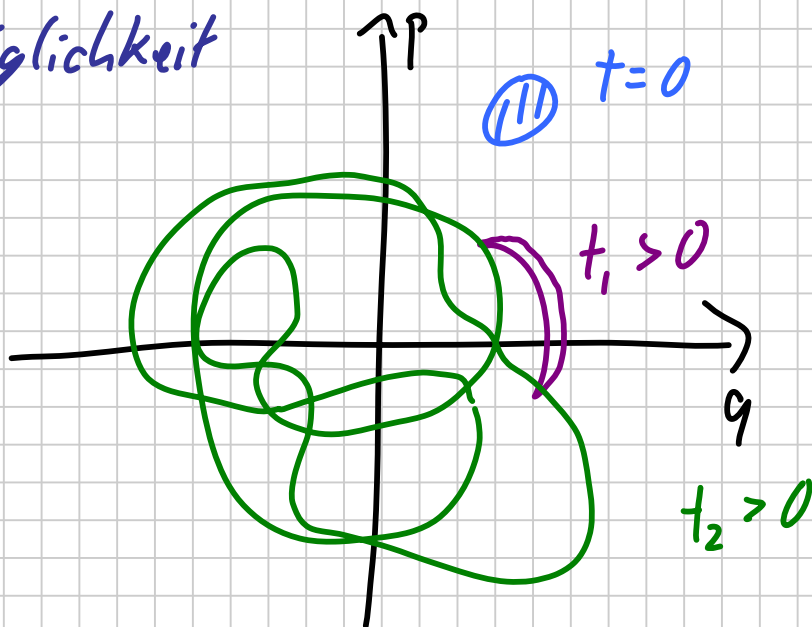


Frage: Wie ändert sich das Phasenraum-Volumen bei der Zeitevolution / beliebigen Berührungstrafos?

Antwort: gar nicht: Liouville-Theorem



2. Möglichkeit



chaotisch!

Beweis über symplektische Struktur der
Hamilton'schen Mechanik

7.1.2008

Viele Aussagen dieses Kapitels lassen sich auf
Systeme mit nicht-holonomen Zwangsbedingungen der
Form $d\phi_m = 0$ verallgemeinern. Z. B. lauten dann
die Hamilton-Gleichungen:

$$\left(\dot{\vec{q}} - \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \right)_{\phi} = 0$$

$$\left(\dot{\vec{p}} + \frac{\partial H}{\partial \vec{q}} \right)_{\phi} = \sum_{m=1}^z \lambda_m(t) \vec{\Psi}_m(\vec{q}_{\phi}, t)$$

mit $\vec{\Psi}_m(\vec{q}_{\phi}, t) \cdot \dot{\vec{q}}_{\phi} + \Psi_{m0}(\vec{q}_{\phi}, t) = 0$