

## 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  $\mathcal{J}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{q}}} \cdot \dot{\vec{q}} - L$  (\*)

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

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  $\Delta$

(ii) Einsetzen in \*

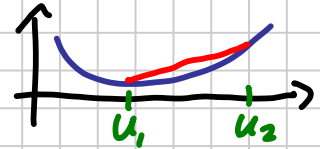
(63)  $\rightarrow$   $H(\vec{q}, \vec{p}, t) = \mathcal{J}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}(\vec{q}, \vec{p}, t), t)$  Hamilton-Funktion

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  $F(u) = u^4$ )

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  $u_m(v)$

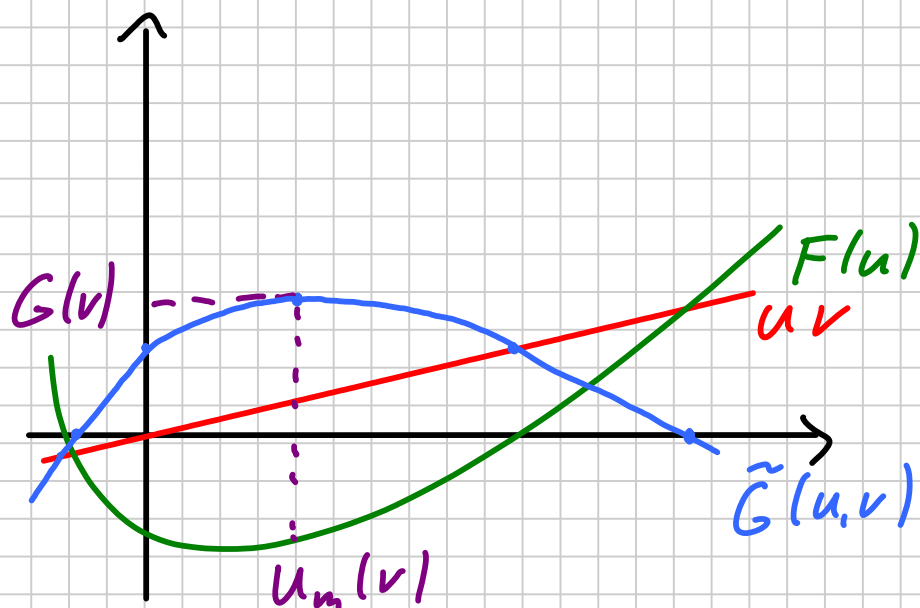
mit  $0 = \frac{\partial \tilde{G}}{\partial u}(v, u_m(v)) = v - F'(u_m(v)) \quad (\triangleright)$

Betrachte im Folgenden nur  $v$ , für die  $-\infty < u_m(v) < \infty$   
 $u_m(v)$  ist streng monoton ansteigend:

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

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

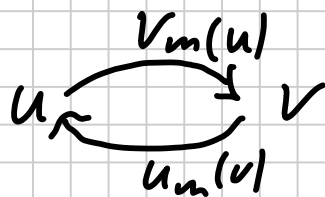
$G$  strikt konvex  $\rightarrow \tilde{F}$  strikt konkav als Fkt. von  $v$   
 $\rightarrow$  eindeutiges Maximum bei  $v_m(u)$  mit  $v_m'(u) > 0$

⑥5 bestimmt durch

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

$$= u - u_m(v_m(u)) - \underbrace{(v - F'(u_m(v)))}_{=0} u'_m(v) \Big|_{v=v_m(u)}$$

Als Abbildungen sind  $u_m$  und  $v_m$  also invers:



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

$$\begin{aligned} F^*(u) &= \tilde{F}(u, v_m(u)) = v_m(u) \underbrace{[u - u_m(v_m(u))]}_{=0} + \underbrace{F(u_m(v_m(u)))}_{=u} \\ &= F(u) \end{aligned}$$

□

Für duale Funktionen  $F(u), G(v)$  gilt die

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

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

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)  
 $\bar{F}(u) = -F, \bar{G}(v) = -G(-v), \bar{v} = -v, \bar{u}_m(\bar{v}) = u_m(v)$

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

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

(66) 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:

$$\vec{h}^T \frac{\partial^2 F}{\partial \vec{u}^2} \vec{h} > 0 \quad \forall \vec{h} \neq 0$$

$\Downarrow$  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  $\Delta$  eindeutig ist.

Angenommen, es gäbe 2 verschiedene Lösungen

$$\vec{u}_1 \neq \vec{u}_2, \text{ d.h. } \vec{u}_2 - \vec{u}_1 \neq \vec{0}. \text{ Dann folgt:}$$

(68)

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

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

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

1.12.08  
31.05.10

Die Legendre-Transformierte  $G$  von  $F$  folgt nun

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

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  $\lambda$  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!**  $\lambda$  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  $\Delta$  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

(74)  $\vec{q}_\phi(t), \vec{p}_\phi(t) \leadsto$  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  $H_\phi$  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

02.06.10

## 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  $\leadsto L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = T(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) - V(\vec{q}, t)$

$$\text{mit } T(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = \frac{1}{2} \sum_{e, \ell} a_{e\ell}(\vec{q}, t) \dot{q}_e \dot{q}_\ell + \sum_e a_e(\vec{q}, t) \dot{q}_e + a_0(\vec{q}, t)$$

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

„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

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

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

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

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

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 in  $\vec{x} \leftrightarrow \vec{p}$ !

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 zurückgestellt)

## 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 79 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 Funktional 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 7.06.10

# Theorie II: Vorlesung 16

Notiztitel

09.12.2008

## 8.2.3 Kleine Schwingungen

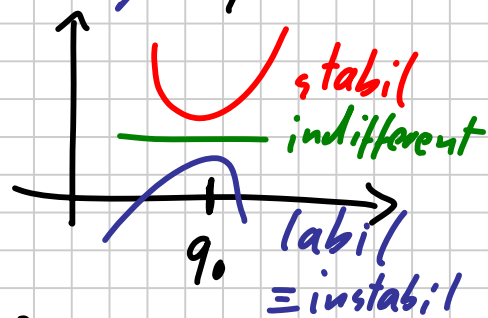
Wir betrachten nochmals den Fall  $T = T(\dot{\vec{q}}, \dot{\vec{q}})$  [8.2.1 a] und nehmen an, dass auch  $V$  zeitunabhängig ist:

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

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

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)

(i) M ist reell + symmetrisch (=hermitesch), also <sup>numerisch</sup> diagonalisierbar

mit  $O_1^T M O_1 = M_D \equiv \text{diag}(\mu_1, \dots, \mu_f) \Leftrightarrow M = O_1 M_D O_1^T$   
↑ 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:

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

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

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

Die Diagonalmatrix wird durch eine Umskalierung (i.A.

nicht-orthogonale Trafo) eliminiert:  $\dot{q}' = M_D^{-1/2} \ddot{q}''$

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

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

mit  $B' = M_D^{-1/2} O_1^T B O_1 M_D^{-1/2}$  reell, symmetrisch

(ii) 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

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

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

Eigenlösungen:  $\vec{z}^{(\mu)}(t) = z_\mu(t) \hat{e}_\mu \quad (\mu=1, 2, \dots, f)$  Eigenfrequenz

mit

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

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

$\uparrow$  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  $\mathbf{q}_\mu$  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  $\beta_\mu$  darstellen: Es gilt  $\forall \mu, \mu' = 1, 2, \dots, f$

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

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

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

(84)  $z_\mu(0) = \vec{q}_\phi(0) \cdot \vec{q}_\mu$ ;  $\dot{z}_\mu(0) = \dot{\vec{q}}_\phi(0) \cdot \vec{q}_\mu$  festgelegt.

Statt auf die Bewegungsgleichungen lässt sich die Punkttransformation  $\vec{q}(t) \rightarrow \vec{z}(t)$ ;  $\vec{z} = (z_1, \dots, z_f)$

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

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  $\Delta$  übereinstimmt.

b) Hamilton-Gleichung und Hamilton-Funktion

Für das ursprüngliche Problem lauten die Hamilton-

$$\text{Gleichungen: (i) } \dot{\vec{q}} = M^{-1} \vec{p}; \quad \text{(ii) } \dot{\vec{p}} = -B \vec{q}$$

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

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

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

$$\text{Einsetzen in (i) liefert: } \sum_{\mu} \dot{z}_{\mu} \vec{q}_{\mu} = \dot{\vec{q}} = M^{-1} \vec{p} = \sum_{\mu} \pi_{\mu} \vec{q}_{\mu}$$

85 (entkoppelt; spezielle Wahl von  $\vec{q}_{\mu}$  hier unwichtig)

bzw. in (iii): 
$$\sum_{\mu} \pi_{\mu} \ddot{q}_{\mu} = M^{-1} \dot{\vec{p}} = -M^{-1} B \dot{\vec{q}} = -\sum_{\mu} z_{\mu} M^{-1} B \dot{q}_{\mu}$$

spezielle Wahl  $\vec{q}_{\mu}$  (d.h.  $\vec{q}_{\mu}$  Rechts-EV von  $M^{-1}B$  zu EW  $\beta_{\mu}$ )

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

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

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:

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

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

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

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

# Theorie II: Vorlesung 17

Notiztitel

15.12.2008

## 8.4 Erhaltungsgrößen und Poisson-Klammern (8.3.1 zurückgestellt)

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:

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

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:

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

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

(87)

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

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

Jacobi-Identität

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

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

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

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

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

□

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  $\vec{q} \rightarrow \bar{\vec{q}}(\vec{q}, t)$ ; lassen Struktur der Lagrange-Gleichungen invariant (falls Trafo genügend glatt).

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

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

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

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

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

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

Die kanonische Struktur ist offensichtlich erhalten:

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

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

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  $\tilde{L} \neq \tilde{L}$  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?

\*  $\leadsto$

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

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

Die Differentiale sind hier als unabhängig anzusehen  $\leadsto$

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

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

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

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

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

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

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

Noch zu zeigen: die Berührungstransformation  $\gamma, A$  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. □

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  
14.06.10

# Theorie II: Vorlesung 18

## 8.5.1 Alternative Formulierungen der Berührungstransformation

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

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

Dabei lauten die Transformationsgleichungen:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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  $\delta G$  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

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

(97) gilt:

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

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: keine Summe!

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

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**

16.6.10

# Theorie II: Vorlesung 19

Notiztitel

05.01.2009

(Kurz wiederholung Hamilton-Formalismus)

## 8.5.4 ( $\cong$ 8.3.1\*) Die Hamilton-Jacobi-Gleichung

Bisher: a) Lagrange-Gleichungen  $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0$

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:  $(\bar{q}, \bar{p}) \rightarrow (\bar{q}, \bar{p}), H \rightarrow \bar{H}$

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

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  $F_2(\vec{q}, \bar{p}, t)$  (vgl. 8.5.1)

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

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

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

Damit erhalten wir die Bestimmungsgleichung:

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

Hamilton-Jacobi-Gleichung

Vorgehen im Hamilton-Jacobi-Formalismus

(i) Lösen der HJ-Gleichung

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

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

Die Auflösung ist eindeutig, falls

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

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  $\vec{p} = \frac{\partial S^*}{\partial \vec{x}} = \vec{\alpha} = \vec{p}$

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

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

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

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

$$x_{1/2}^0 \equiv \beta_{1/2} = \frac{\partial S^*}{\partial \alpha_{1/2}} = x_{1/2} - \frac{\alpha_{1/2}}{m} t ; \quad x_{1/2}(t; \vec{\alpha}, \vec{\beta}) = \sqrt{\frac{2E_{1/2}}{m}} t + x_{1/2}^0$$

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

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  $\alpha_3 \equiv E_3$ :

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

|||  
-t<sub>0</sub>

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

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

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

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

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

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

durch Lösen des Integrals und Invertierung.

# Theorie II: Vorlesung 20

Notiztitel

06.01.2009

Bisher: im 1-dimensionalen t-unabh. Fall  $\alpha (= \bar{p}) = E$  gewählt.

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

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

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

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

$$\frac{dS^*}{dt}(\vec{q}, t; \vec{\alpha}) = \frac{\partial S^*}{\partial \vec{q}}(\vec{q}, t; \vec{\alpha}) \cdot \dot{\vec{q}} + \frac{\partial S^*}{\partial t} \Big|_{\phi}$$

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

$$\stackrel{(\text{vgl. 8.3})}{=} \tilde{L}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, \vec{p}, t) = L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t)$$

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

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

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

## 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:

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

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

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

↑ 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:

$$\phi_t = \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{q}} = \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q}^2} + \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q} \partial \bar{q}} \frac{\partial \bar{q}}{\partial \bar{q}}; \quad \mathbb{1}_t = \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{p}} = \frac{\partial^2 F_1}{\partial \bar{q} \partial \bar{q}} \frac{\partial \bar{q}}{\partial \bar{p}}$$

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

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

Entsprechend erhalten wir aus den Ableitungen von  $\Delta$ :

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

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

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!

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

wegen  $(A^{-1})^T = (A^T)^{-1}$

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

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

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

Insgesamt gilt also:

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

Da natürlich auch gilt

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

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

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

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

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

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.

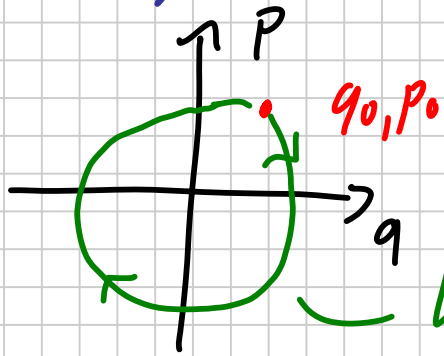
**Determinismus:** Im Rahmen der klassischen Mechanik ist die Zeitentwicklung eines Systems für alle Zeiten durch die Anfangsbedingungen bestimmt:

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

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

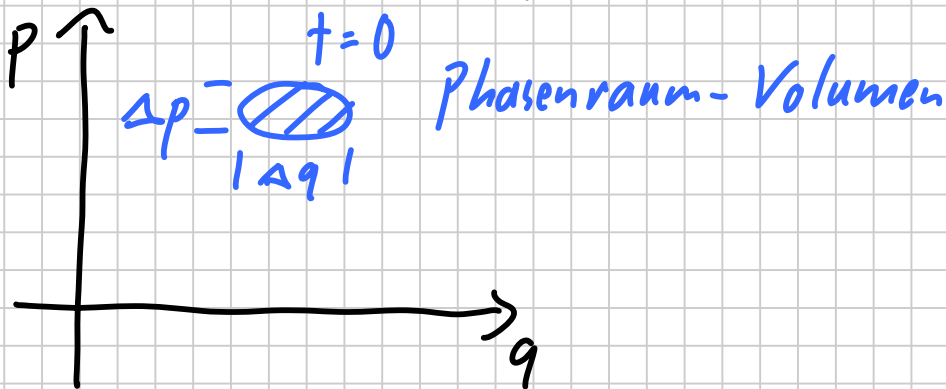
**Frage:** wie wirken sich Unbestimmtheiten in den Anfangsbedingungen aus?

Darstellung im Phasenraum (2 dim. Schnitt):



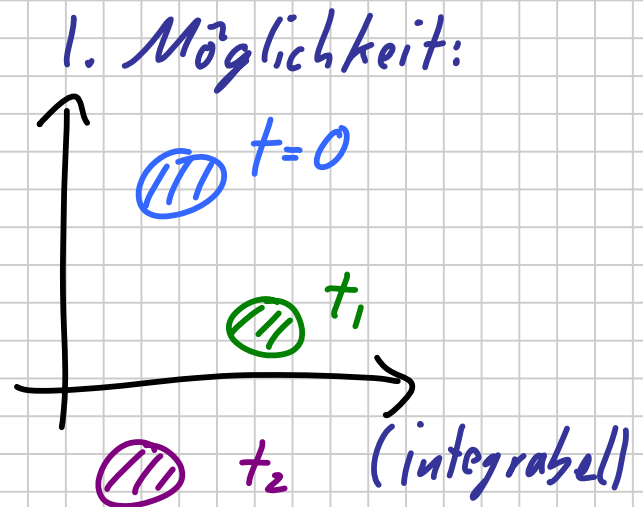
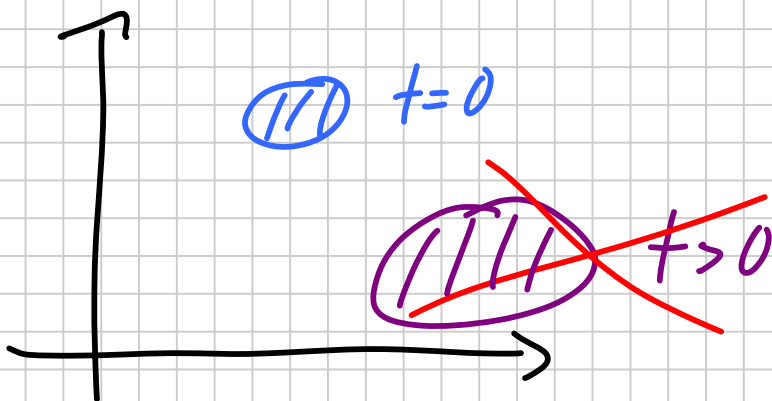
harm. Oszillator: Zeitevolution ist Ellipse

Unsicherheit in Anfangsbedingungen / Ensemble

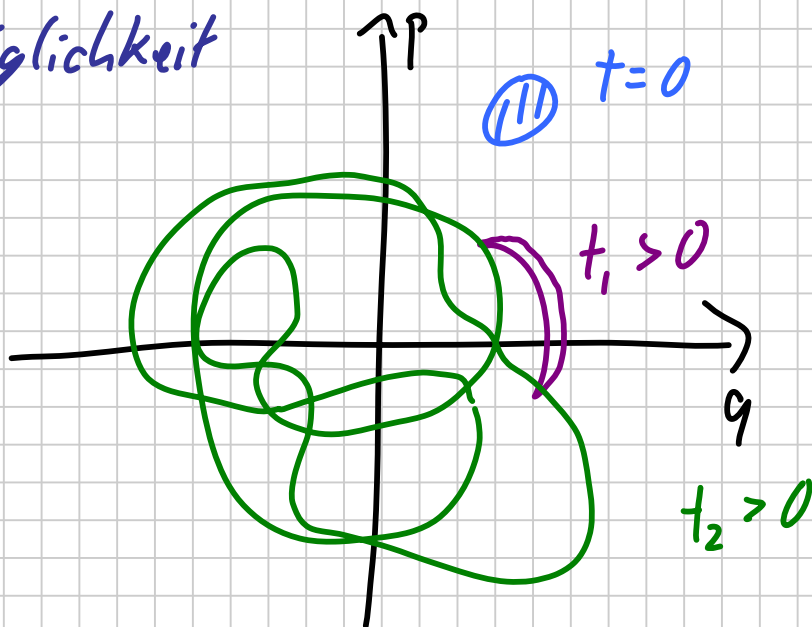


Frage: Wie ändert sich das Phasenraum-Volumen bei der Zeitevolution / beliebigen Berührungstrafos?

Antwort: gar nicht: Liouville-Theorem



2. Möglichkeit



chaotisch!

Beweis über symplektische Struktur der  
Hamilton'schen Mechanik

7.1.2009

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  $\vec{\Psi}_m(\vec{q}_{\phi}, t) \cdot \dot{\vec{q}}_{\phi} + \Psi_{m0}(\vec{q}_{\phi}, t) = 0$  23.6.2010

Diese Notizen zur Vorlesung "Theoretische Physik II: Allgemeine Mechanik" (Prof. Dr. Nils Blümer, Universität Mainz, SS 2010) basieren auf einem Skript von Prof. Dr. Peter van Dongen; sie dürfen ohne Genehmigung in keiner Form weiterverbreitet werden.

Weitere Informationen zur Vorlesung: [http://komet337.physik.uni-mainz.de/Bluemer/lectures\\_SS2010](http://komet337.physik.uni-mainz.de/Bluemer/lectures_SS2010)

Kommentare/Korrekturen bitte an Nils Blümer, <mailto:Nils.Bluemer@uni-mainz.de>