Theorie II: Vorlesung 13

Manuskript zur Vorlesung (im WS 2008/09)
Theoretische Physik II - Allgemeine Mechanik
(Prof. Dr. Nils Blümer, Univ. Mainz)

Notiztitel 30.11.2008

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 ⇝ abstrakte Einsichten
- besser für Störungstheorie (z.B. Himmelsmechanik)
- mehr Invarianzen ⇝ 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 $p_\alpha(\vec{q},\dot{\vec{q}},t) = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}(\vec{q},\dot{\vec{q}},t)$ (Δ)

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

Idee: Übergang $L \to \mathcal{J}$; $\dot{q}_\alpha \to p_\alpha$ hilfreich?

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

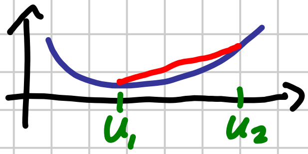
$$\rightsquigarrow \boxed{H(\vec{q},\vec{p},t) = \mathcal{J}(\vec{q},\dot{\vec{q}}(\vec{q},\vec{p},t),t)}$$ Hamilton-Funktion

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: $F''(u) > 0 \ \forall u$



($\rightsquigarrow$ $F(\lambda u_1 + (1-\lambda) u_2) < \lambda F(u_1) + (1-\lambda) F(u_2)$ $\quad (0<\lambda<1)$
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

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

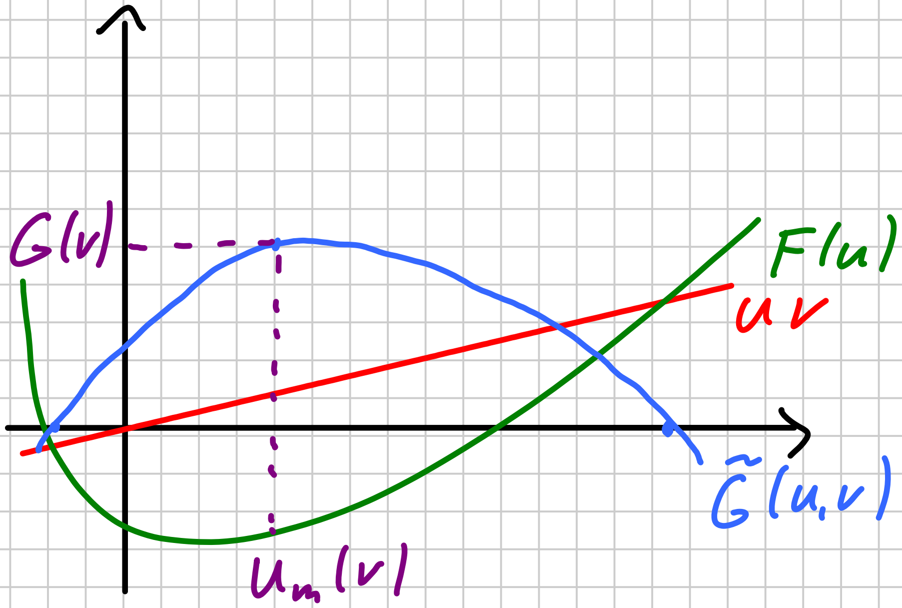
Betrachte im Folgenden nur v, für die $-\infty < u_m(v) < \infty$

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

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

$$= u - u_m(v_m(u))$$

Als Abbildungen sind u_m und v_m also invers:

$$\begin{tikzcd} u \arrow[r, bend left, "v_m(u)"] & v \arrow[l, bend left, "u_m(v)"] \end{tikzcd}$$

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

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

$$= F(u) \quad \square$$

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

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

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

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)

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

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

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

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: $uv \le \frac{1}{2} u^2 + \frac{1}{2} v^2 \iff \frac{1}{2}(u-v)^2 \ge 0$ scharf!

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Theorie II: Vorlesung 14

Notiztitel 02.12.2008

8.1.1 Funktionen mehrerer Variabler

Wir betrachten eine zweimal stetig differenzierbare Funktion $F(\vec{u}) = F(u_1, u_2, \ldots, u_n)$, die streng konvex sein soll:
$$\vec{h}^T \frac{\partial^2 F}{\partial \vec{u}^2} \vec{h} > 0 \quad \forall\ \vec{h} \neq 0$$
$\Leftrightarrow$ 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
$$\vec{0} = \frac{\partial \tilde{G}}{\partial \vec{u}}(\vec{v}, \vec{u}_m(\vec{v})) = \vec{v} - \frac{\partial F}{\partial \vec{u}}(\vec{u}_m(\vec{v})) \qquad (\triangledown)$$
gegeben ist.

Beachte: auch die Gradientenmatrix $\frac{\partial \vec{u}_m}{\partial \vec{v}}$ ist positiv definit, da
$$\vec{0} \overset{\frac{\partial}{\partial \vec{v}} \triangledown}{=} \mathbb{1} - \frac{\partial^2 F}{\partial \vec{u}^2}(\vec{u}_m(\vec{v})) \frac{\partial \vec{u}_m}{\partial \vec{v}}(\vec{v})$$

$$\Leftrightarrow \quad \frac{\partial \vec{u}_m}{\partial \vec{v}}(\vec{v}) = \Big[\underbrace{\frac{\partial^2 F}{\partial \vec{u}^2}(\vec{u}_m(\vec{v}))}_{\text{symm. Matrix}} \Big]^{-1}$$

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 $\triangledown$ 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:

$$0 = \Big[\underbrace{\left(\frac{\partial F}{\partial \vec{u}}\right)(\vec{u}_2) - \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{u}}\right)(\vec{u}_1)}_{=0 \text{ wegen } \Delta} \Big] \cdot \vec{u}_{21}$$

$$= \int_{\vec{u}_1}^{\vec{u}_2} d\vec{u} \cdot \left[\left(\frac{\partial^2 F}{\partial \vec{u}^2}\right)(\vec{u})\ \vec{u}_{21} \right]$$

$$= \int_0^1 d\lambda\ \underbrace{\vec{u}_{21}^{\,T} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \vec{u}^2}\right)(\vec{u}_1 + \lambda \vec{u}_{21})\ \vec{u}_{21}}_{>0 \text{ n.V.}} > 0 \quad ⚡$$

1.12.08

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

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

$$\frac{\partial G}{\partial \vec{v}}(\vec{v}) = \vec{u}_m(\vec{v}) + \left[\frac{\partial \vec{u}_m}{\partial \vec{v}}\right]^T \Big(\underbrace{\vec{v} - \frac{\partial F}{\partial \vec{u}}(\vec{u}_m(\vec{v}))}_{=0\ \Delta} \Big)$$

Zeile

Spalte, weil $\vec{v}$ Spaltenvektor ist

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

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

Rücktransformation: wir führen wieder eine Hilfsfunktion ein:

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

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

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

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 $\overset{n \text{ Terme!}}{\vec{u}\cdot\vec{v}} \leq F(\vec{u})+G(\vec{v})$ 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 Variablen, die nur bezüglich der $\vec{u}$-Variablen Legendre-transformiert werden. In der Anwendung auf die Lagrangefunktion 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:

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

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

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

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

$$\frac{\partial G}{\partial \vec{w}}(\vec{v},\vec{w}) = \left[\frac{\partial \vec{u}_m}{\partial \vec{w}}(\vec{v},\vec{w})\right]^T \underbrace{\left[\vec{v} - \frac{\partial F}{\partial \vec{u}}(\vec{u}_m(\vec{v},\vec{w}),\vec{w})\right]}_{=0} - \frac{\partial}{\partial \vec{w}} F(\vec{u}_m(\vec{v},\vec{w}),\vec{w})$$

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

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 $\vec{q}$ 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 $\dot{\vec{q}}$ $\rightsquigarrow$ 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:

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

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

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

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

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 $\dot{\vec{q}}_m$ auf $\dot{\vec{q}}_m'$ mit

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

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

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

Damit ist die Hamilton-Funktion

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

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:

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

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

Aus den verschiedenen Darstellungen für dH in 8.1.3 folgt

$$\frac{\partial H}{\partial \vec{q}}(\vec{q},\vec{p},t) = -\frac{\partial L}{\partial \vec{q}}(\vec{q},\dot{\vec{q}}_m,t); \qquad \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}(\vec{q},\vec{p},t) = \dot{\vec{q}}_m$$

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

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

Einsetzen in Δ liefert die Hamilton-Gleichungen

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

oder kurz: $$\boxed{\dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{q}}; \qquad \dot{\vec{q}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}}$$

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

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

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

$$= \left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_\phi = -\left(\frac{\partial L}{\partial t}\right)_\phi$$

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

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 $\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} = m\dot{\vec{x}} + \hat{q}\vec{A}(\vec{x},t)$ keine Messgröße, jedoch sind dies die kinetischen Größen

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

Forminvarianz der Hamilton-Gleichungen?

$\rightsquigarrow$ siehe Skript.

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

8.2 Beispiele für die Wirkung des Hamilton-Formalismus

8.2.1 Geschwindigkeitsunabhängige Kräfte

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

mit
$$\begin{aligned} T(\vec{q},\dot{\vec{q}},t) &= \frac{1}{2}\sum_{k\ell} a_{k\ell}(\vec{q},t)\dot{q}_k\dot{q}_\ell + \sum_k a_k(\vec{q},t)\dot{q}_k + a_0(\vec{q},t) \\ &\equiv \frac{1}{2}\dot{\vec{q}}^T \underbrace{M(\vec{q},t)}_{\text{„Massentensor" (symmetrisch, pos. definit)}}\dot{\vec{q}} + \vec{a}(\vec{q},t)\cdot\dot{\vec{q}} + a_0(\vec{q},t) \end{aligned}$$

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

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

Zur Legendre-Transformation benötigen wir

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

Damit folgt die Hamilton-Funktion als

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

$$= \vec{p}^T M(\vec{q})^{-1}\vec{p} - [\tfrac{1}{2}\underbrace{(M^{-1}\vec{p})^T M}_{=\vec{p}^T(M^{-1})^T M = \vec{p}^T M^{-1} M = \vec{p}^T}(M^{-1}\vec{p}) - V(\vec{q}, t)]$$

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

und die Hamilton-Gleichungen lauten

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

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

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

$$\left(*: \ \mathbb{1} = M^{-1}M \xRightarrow{\frac{\partial}{\partial q_a}} 0 = \frac{\partial}{\partial q_a}(M^{-1})M + M^{-1}\frac{\partial M}{\partial q_a} \right.$$

$$\left. \Leftrightarrow \quad \frac{\partial}{\partial q_a}(M^{-1}) = -M^{-1}\frac{\partial M}{\partial q_a}M^{-1} \right)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

Damit hat die Hamilton-Funktion

$$H(\vec{q},\vec{p},t) = \vec{p}\cdot\dot{\vec{q}}_m - L(\vec{q},\dot{\vec{q}}_m,t)$$
$$= \vec{p}^T M^{-1}(\vec{p}-\vec{a}) - \Big[\tfrac{1}{2}(\vec{p}-\vec{a})^T M^{-1}(\vec{p}-\vec{a}) + \vec{a}^T M^{-1}(\vec{p}-\vec{a}) + a_0(\vec{q},t) + V(\vec{q},t)\Big]$$
$$= \tfrac{1}{2}(\vec{p}-\vec{a})^T M^{-1}(\vec{p}-\vec{a}) + \big[V(\vec{q},t) - a_0(\vec{q},t)\big]$$

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

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

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

8.2.2 Lorentz-Kräfte

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

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

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

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

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

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

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

Beispiel: N nicht-ww Teilchen, kartesische Koordinaten:

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

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

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

„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 $\tilde{L}$:

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

$$= \int_{t_1}^{t_2} dt\,[\dot{\vec{q}}(t)\vec{p}(t) - H(\vec{q}(t),\vec{p}(t),t)]$$

und bestimmen seinen stationären Punkt:

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

$$= \int_{t_1}^{t_2} dt\left[\left(\frac{\partial\tilde{L}}{\partial\vec{q}}\right)_\phi\cdot\vec{\kappa}(t) + \left(\frac{\partial\tilde{L}}{\partial\dot{\vec{q}}}\right)_\phi\cdot\dot{\vec{\kappa}}(t) + \left(\frac{\partial\tilde{L}}{\partial\vec{p}}\right)_\phi\cdot\vec{\pi}(t)\right]$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} dt\left\{\left[\left(\frac{\partial\tilde{L}}{\partial\vec{q}}\right)_\phi - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\tilde{L}}{\partial\dot{\vec{q}}}\right)_\phi\right]\cdot\vec{\kappa}(t) + \left(\frac{\partial\tilde{L}}{\partial\vec{p}}\right)\cdot\vec{\pi}(t)\right\}$$

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

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

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

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

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

8.12.08

Theorie II: Vorlesung 16

Notiztitel 09.12.2008

8.2.3 Kleine Schwingungen

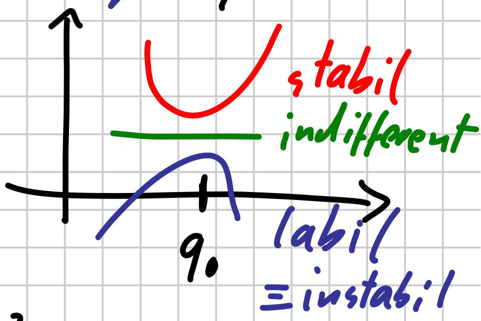
Wir betrachten nochmals den Fall $T = T(\vec{q}, \dot{\vec{q}})$ [8.2.1 a)] und nehmen an, dass auch V zeitunabhängig ist:

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

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

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

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



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

$$V(\vec{q}) = V(\vec{q}_0) + \underbrace{\frac{\partial V}{\partial \vec{q}}(\vec{q}_0)}_{= 0 \text{ n.V.}} \cdot (\vec{q} - \vec{q}_0) + \frac{1}{2} (\vec{q} - \vec{q}_0)^T \frac{\partial^2 V}{\partial \vec{q}^2}(\vec{q}_0) \, (\vec{q} - \vec{q}_0) + \ldots$$

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

$\rightsquigarrow$ $V(\vec{q}) = \frac{1}{2} \vec{q}^T B \vec{q}$ 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 $\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{q}}}\right) = \frac{\partial L}{\partial \vec{q}}$ lautet hier:

$$M \ddot{\vec{q}} = -B \vec{q} \quad (*) \Leftrightarrow \sum_{\ell=1}^{f} M_{k\ell} \ddot{q}_\ell = -\sum_{\ell=1}^{f} B_{k\ell} q_\ell \quad \forall k = 1,\dots,f$$

f linear gekoppelte Differentialgleichungen ⇝ allgemeine Strategie: Entkopplung durch orthogonale Transformationen

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

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

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

Daher gehen wir schrittweise vor (divide et impera)

M ist reell + symmetrisch (= hermitesch), also diagonalisierbar (i.A. numerisch)

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

orthogonale Matrix: $O^T = O^{-1} \Rightarrow (O\vec{x}) \cdot (O\vec{y}) = \vec{x} \cdot \vec{y}$

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

$$* \Leftrightarrow \quad M O_1 \ddot{\vec{q}}\,' = -B O_1 \vec{q}\,'$$

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

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

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

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

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

mit $B' = M_D^{-\frac{1}{2}} O_1^T B_1 O_1 M_D^{-\frac{1}{2}}$ reell, symmetrisch

also diagonalisierbar: $O_2^T B' O_2 = B_D' = \mathrm{diag}(\beta_1, \ldots, \beta_f)$

und positiv semidefinit: $\beta_k \geq 0 \quad \forall\, k = 1, .., f$

Durch entsprechende Transformation der Koordinaten:

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

vereinfachen sich die Bewegungsgleichungen zu

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

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

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

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

Normalkoordinaten

Eigenschwingungen in den ursprünglichen Koordinaten:

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

Die Vektoren $\mathbf{q}_\mu$ bilden einen vollständigen Satz „M-orthonormaler" Vektoren:

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

die außerdem „B-orthogonal" sind:

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

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

$$(M\vec{q}_{\mu'})^T (M^{-1}B - \beta_\mu)\vec{q}_\mu = \vec{q}_{\mu'}^{\,T}(B - \beta_\mu M)\vec{q}_\mu$$

$$= (\beta_{\mu'} - \beta_\mu)\delta_{\mu\mu'} = 0$$

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

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 $\vec{q}(t) \to \vec{z}(t)$; $\vec{z} = (z_1, \dots, z_f)$

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

auch auf die Lagrange-Funktion anwenden:

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

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

Hamilton-Gleichung und Hamilton-Funktion

Für das ursprüngliche Problem lauten die Hamilton-Gleichungen: $\dot{\vec{q}} = M^{-1}\vec{p}$; $\dot{\vec{p}} = -B\vec{q}$

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

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

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

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

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 $\vec{q}_\mu$ unwichtig) bzw. $\sum_\mu \dot{\pi}_\mu \vec{q}_\mu = M^{-1}\dot{\vec{p}} = -M^{-1}B\vec{q}\,' = -\sum_\mu z_\mu M^{-1}B\vec{q}_\mu$

$$\underset{\text{spezielle Wahl der } \vec{q}_\mu}{\overset{\uparrow}{=}} -\sum_\mu \beta_\mu z_\mu \vec{q}_\mu$$

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

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

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 $(\vec{q},\vec{p}) \to (\vec{q}\,',\vec{p}\,')$, 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:

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

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

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

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

10.12.08

Theorie II: Vorlesung 17

8.4 Erhaltungsgrößen und Poisson-Klammern

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

$\rightsquigarrow$ Zeitentwicklung

$$\frac{d}{dt} A_\phi(t) = \left(\frac{\partial A}{\partial \vec{q}}\right)_\phi \cdot \dot{\vec{q}}_\phi + \left(\frac{\partial A}{\partial \vec{p}}\right)_\phi \cdot \dot{\vec{p}}_\phi + \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_\phi$$

$$= \left(\frac{\partial A}{\partial \vec{q}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial A}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{q}}\right)_\phi + \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_\phi$$

$$= \{A, H\}_\phi + \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_\phi$$

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

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

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-Klammern

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

$$\left.\begin{aligned} \{\alpha_1 A_1 + \alpha_2 B_2, B\} &= \alpha_1 \{A_1, B\} + \alpha_2 \{A_2, B\} \\ \{A, \beta_1 B_1 + \beta_2 B_2\} &= \beta_1 \{A, B_1\} + \beta_2 \{A, B_2\} \end{aligned}\right\} \text{bilinear}$$

$$\{A_1 A_2, B\} = A_1\{A_2,B\} + A_2\{A_1,B\}$$
$$\frac{\partial}{\partial t}\{A,B\} = \left\{\frac{\partial A}{\partial t}, B\right\} + \left\{A, \frac{\partial B}{\partial t}\right\}$$
} 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: $\frac{d}{dt}A_\phi = \{A,H\}_\phi + \frac{\partial A}{\partial t} = 0$; $\frac{d}{dt}B = \{B,H\}_\phi + \frac{\partial B}{\partial t} = 0$

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

$\square$

Beispiele: siehe unten/Übung.

Spezialfälle der Poisson-Klammer:

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

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

Zuletzt noch die fundamentalen Poisson-Klammern:

$$\{q_\alpha, q_\ell\} = 0, \quad \{p_\alpha, p_\ell\} = 0; \quad \{q_\alpha, p_\ell\} = \delta_{\alpha\ell}$$

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

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

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

heisst kanonisch, falls sie die Struktur der Hamilton-Gleichungen invariant lässt:

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

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 $\tilde{L} = \dot{\vec{q}} \cdot \vec{p} - H(\vec{q},\vec{p},t)$ gilt daher auch $\delta \bar{\tilde{S}} = 0$ (analoge Ausdrücke mit gestrichenen Größen). Achtung: Randbedingungen nicht äquivalent (siehe unten).

Beispiele: a) Reskalierung der Impulsvariablen

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

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:

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

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

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

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

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

$* \rightsquigarrow$

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

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

Die Differentiale sind hier als unabhängig anzusehen $\rightsquigarrow$

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

Damit ist die Berührungstrafo $(\vec{q}, \vec{p}) \to (\bar{\vec{q}}, \bar{\vec{P}})$ eindeutig festgelegt, falls $\frac{\partial^2 F_1}{\partial \vec{q} \partial \bar{\vec{q}}} \neq 0$:

$$\vec{p} = \frac{\partial F_1}{\partial \vec{q}}(\vec{q}, \vec{\bar{q}}, t) \rightsquigarrow \vec{\bar{q}}(\vec{q}, \vec{p}, t)$$

$$\vec{\bar{p}} = -\frac{\partial F_1}{\partial \vec{\bar{q}}}(\vec{q}, \vec{\bar{q}}(\vec{q}, \vec{p}, t), t)$$

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

Unter zusätzlichen Bedingungen (z.B. F_1 strikt konvex in $\vec{q}$), ist auch das Auflösen nach anderen Variablen-paaren möglich, z.B. $(\vec{\bar{q}}, \vec{p}) \to (\vec{q}, \vec{\bar{p}})$ (siehe Skript).

Noch zu zeigen: die Berührungstransformation Ψ, Λ ist kanonisch.

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

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

Bei der Variation (mit $\delta\vec{q} = \varepsilon \vec{k}$; $\delta \vec{p} = \varepsilon \vec{\pi}$; $\delta\vec{\bar{q}} = \varepsilon \vec{\bar{k}}$, $\delta \vec{\bar{p}} = \varepsilon \vec{\bar{\pi}}$) ist zu beachten, dass zwar $\vec{k}(t_1) = \vec{k}(t_2) = 0$ fest ist, aber $\vec{\bar{k}}$ am Rand variieren kann. Damit gilt:

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

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

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

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

Dies kann nur für alle Variationen gelten, falls

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

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

$$\overset{\Delta}{\leadsto} \quad \vec{p} = \frac{\partial F_1}{\partial \vec{q}} = -\bar{\vec{q}} \; ; \qquad \bar{\vec{p}} = -\frac{\partial F_1}{\partial \bar{\vec{q}}} = \vec{q}$$

d.h. $\quad (\vec{q}, \vec{p}) \to (\bar{\vec{q}}, \bar{\vec{p}}) = (-\vec{p}, \vec{q})$

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

Notiztitel 16.12.2008

8.5.1 Alternative Formulierungen der Berührungstransformation

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

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

Dabei lauten die Transformationsgleichungen:

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

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

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

bezüglich der neuen Koordinaten/Impulse einführen:

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

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

$$\left(0 = \frac{\partial \tilde{F}_2(\vec{q},\vec{\bar{q}},\vec{\bar{p}},t)}{\partial \vec{\bar{q}}} = \vec{\bar{p}} + \frac{\partial F_1}{\partial \vec{\bar{q}}} \quad \text{ok.}\right)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

(8.5.2 Berührungstransformationen als Gruppe)

8.5.3 Infinitesimale Berührungstransformationen

Betrachte Berührungstransformationen nahe der Identität, die durch

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

erzeugt werden. Die Trafo-Gleichungen lauten dann:

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

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

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

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:

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

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

Auch f_2 wird als erzeugende Funktion bezeichnet.

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

$$\begin{aligned}\delta G &\equiv G(\bar{\vec{q}},\bar{\vec{p}},t) - G(\vec{q},\vec{p},t) \\ &= \frac{\partial G}{\partial \vec{q}}\cdot\delta\vec{q} + \frac{\partial G}{\partial \vec{p}}\cdot\delta\vec{p} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ &= \varepsilon\left(\frac{\partial G}{\partial \vec{q}}\frac{\partial f_2}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial G}{\partial \vec{q}}\frac{\partial f_2}{\partial p}\right) = \varepsilon\{G, f_2\} \qquad (\Delta)\end{aligned}$$

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:

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

Dann gilt:

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

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

$$\overset{\Delta}{=} \varepsilon \{H, f_2\} = -\varepsilon \{f_2, H\}$$

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

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

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

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

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

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

Die durch H erzeugte Berührungstransformation bildet also den Punkt $(\vec{q}_q(t), \vec{p}_q(t))$ im Phasenraum auf den Punkt $(\vec{q}_\phi(t+\delta t)), \vec{p}_\phi(t+\delta t))$ ab: auch die infinitesimale Zeitentwicklung lässt sich als kanonisch Transformation auffassen!

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

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

gilt:

$$F_1(\vec{q},\vec{\bar{q}},t) = F_2(\vec{q},\vec{\bar{p}},t) - \vec{\bar{p}}\cdot\vec{\bar{q}} = \vec{\bar{p}}\cdot(\vec{q}-\vec{\bar{q}}) + H(\vec{q},\vec{\bar{p}},t)\delta t$$

$$= -\vec{p}\cdot\delta\vec{q} + H(\vec{q},\vec{p},t)\delta t \qquad + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

$$= -[\vec{p}\cdot\dot{\vec{q}} - H(\vec{q},\vec{p},t)]\delta t = -L(\vec{q},\dot{\vec{q}},t)\delta t$$

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:

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

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

Frohe Weihnachten!

// 17.12.08