

Kapitel 6

Hamiltonsche Mechanik

Wir werden im folgenden einen weiteren Formalismus zur Behandlung von mechanischen Bewegungsabläufen kennenlernen, der wiederum äquivalent zu dem Lagrangeformalismus ist. Während über das d'Alembertsche Prinzip die Newtonsche Formulierung der Mechanik dahingehend erweitert wurde, dass Nebenbedingungen, die einem Massenpunkt oder Massenpunktsystem auferlegt werden, in die Betrachtung einbezogen werden können, die Lagrangegleichungen 2. Art aber durch den Wegfall dieser Nebenbedingungen einen (zum Teil bedeutenden) rechnerischen Vorteil liefern, ist die Situation hier anders. Die neuen Gleichungen sind zu den Lagrangegleichungen 2. Art exakt äquivalent, so dass sich zunächst kein offensichtlicher Vorteil aus dieser neuen Beschreibungsweise ergibt.

Dieser neue Zugang hat aber den bedeutenden Vorteil, dass sich die mathematische Struktur der klassischen Mechanik einfacher erkennen läßt, was dazu führte, dass die Erweiterungen der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik auf der Hamiltonschen Formulierung der Mechanik beruhen. Ohne die Hamiltonsche Mechanik ist in der Tat eine Formulierung der Quantenmechanik unmöglich.

6.1 Die Hamiltonschen oder kanonischen Gleichungen

In einem früheren Kapitel hatten wir schon den zu einer generalisierten Koordinate q_α gehörenden generalisierten Impuls p_α über die Beziehung

$$p_\alpha = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \quad (6.1)$$

eingeführt und festgestellt, dass für freie Systeme die Lagrangegleichungen identisch die Newtonschen Bewegungsgleichungen reproduzieren,

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = \dot{p}_\alpha + \frac{\partial U}{\partial q_\alpha} = \dot{p}_\alpha - F_i = 0, \quad (6.2)$$

wenn sich der Massenpunkt in einem Potential bewegt und die kinetische Energie nicht explizit von den generalisierten Koordinaten abhängt. In diesem Sinne sind also die generalisierten Impulse p_α tatsächlich als Verallgemeinerungen der gewöhnlichen (mechanischen) Impulse zu verstehen, sind aber nicht unbedingt mit ihnen äquivalent.

Zu jeder generalisierten Koordinate existiert genau ein generalisierter Impuls, die Paare (q_α, p_α) heissen **kanonisch konjugiert** (einander zugeordnet). Zu einer kartesischen Koordinate gehört meist eine Komponente des gewöhnlichen Impulses, zu einer Winkelkoordinate eine Komponente des Drehimpulses.

6.1.1 Beispiel: generalisierter Impuls eines Elektrons in einem elektromagnetischen Feld

Ein Beispiel für die eben gemachte Aussage, dass mechanische und generalisierte Impulse nicht äquivalent sein müssen ist, findet man in der Elektrodynamik. Die Lagrangefunktion eines Elektrons in einem elektromagnetischen Feld lautet

$$L = \frac{m}{2} \dot{\mathbf{r}}^2 + e\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{r}} - e\phi, \quad (6.3)$$

woraus man über die Lagrangegleichungen die Lorentzkraft herleiten kann. Die generalisierten Impulse sind hierzu

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i + eA_i, \quad (6.4)$$

zu dem mechanischen Impuls $m\dot{x}_i$ kommt also ein Beitrag des Vektorpotentials \mathbf{A} hinzu.

6.1.2 Die Legendre-Transformation

Den zu einer generalisierten Koordinate q_α gehörende generalisierte Impuls p_α erhält man nach der Definition (4.111) als

$$p_\alpha = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}. \quad (6.5)$$

Für die weitere Entwicklung der Theorie ist es notwendig, eine Funktion $H = H(q_\alpha, p_\alpha, t)$ zu konstruieren, die, im Gegensatz zu der Lagrangefunktion $L = L(q_\alpha, \dot{q}_\alpha, t)$, von den generalisierten Impulsen und nicht von den generalisierten Geschwindigkeiten abhängt. Weiterhin soll ihre partielle Ableitung nach dem Impuls p_α wieder die generalisierte Geschwindigkeit \dot{q}_α ergeben. Dies wird über eine **Legendretransformation** erreicht. Solche Transformationen spielen später in der Thermodynamik eine bedeutende Rolle, deswegen werden wir sie hier im Detail untersuchen.

Der Einfachheit halber betrachten wir eine Lagrangefunktion $L = L(q, \dot{q}, t)$, die nur von einer generalisierten Koordinate und der dazugehörigen generalisierten Geschwindigkeit abhängt. Der generalisierte Impuls wird somit zu

$$p = \frac{\partial L(\dot{q})}{\partial \dot{q}}, \quad (6.6)$$

wobei wir nur die Abhängigkeit der Lagrangefunktion von der generalisierten Geschwindigkeit explizit aufführen. Wir suchen also eine Funktion $H = H(p)$, die von dem generalisierten Impuls (6.6) abhängt und die der Beziehung

$$\dot{q} = \frac{\partial H(p)}{\partial p} \quad (6.7)$$

genügt. Zunächst wird aus Gl. (6.6) ersichtlich, dass der Impuls den Anstieg der Funktion $L(\dot{q})$ am Punkt \dot{q} beschreibt. Die Funktion $H(p)$ ist also eine Darstellung der Funktion $L(\dot{q})$, bei der anstelle der Variablen \dot{q} der Anstieg der Funktion $L(\dot{q})$ an der Stelle \dot{q} als Argument auftaucht.

Nehmen wir nun an, dass die Lagrangefunktion $L(\dot{q})$ eine konvexe Funktion bezüglich der generalisierten Geschwindigkeit \dot{q} sei. Das heisst, dass die

zweite Ableitung $\partial^2 L / \partial \dot{q}^2$ immer positiv ist. Mit anderen Worten, der Anstieg

$$p(\dot{q}) = \frac{\partial L(\dot{q})}{\partial \dot{q}} \quad (6.8)$$

sei eine streng monoton wachsende Funktion von \dot{q} (eine ähnliche Argumentation gilt, wenn die Funktion $-L$ konvex ist). Diese Bedingung der strengen Monotonie hat zur Folge, dass die Funktion $p(\dot{q})$ eindeutig ist und eine eindeutige Umkehrfunktion $\dot{q}(p)$ besitzt. Es ist also möglich, eine Parametrisierung der Funktion nicht über die eigentliche unabhängige Variable $\dot{q}(p)$, sondern über deren Anstieg $p(\dot{q})$ zu finden. Würde die zweite Ableitung verschwinden, dann würde offensichtlich wegen $\partial L / \partial \dot{q} = p = \text{const.}$ keine eindeutige Umkehrfunktion ableitbar sein.

Wir wollen nun die Funktion $H(p)$ graphisch konstruieren (siehe Abb. 6.1). Die konvexe Lagrangefunktion $L(\dot{q})$ ist in blau dargestellt. Ihr Anstieg am

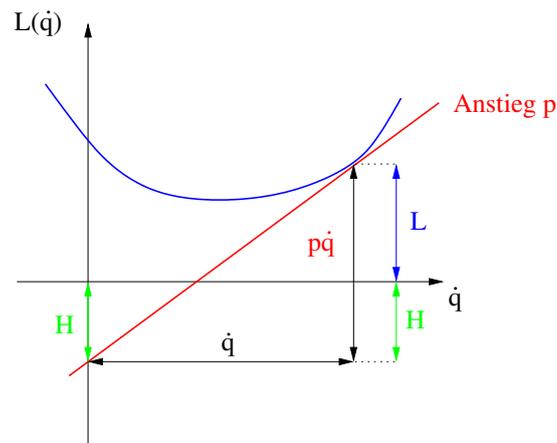


Abbildung 6.1: Graphische Herleitung der Legendretransformation.

Punkt \dot{q} ist durch die rote Gerade markiert. Diese Gerade mit Anstieg p schneidet die L -Achse im Punkt $-H$, angedeutet in grün. Offensichtlich hängt aber der Schnittpunkt der roten Geraden vom Anstieg p ab, deshalb ist der Schnittpunkt mit der L -Achse eine Funktion $H = H(p)$. Aus der Darstellung ist weiterhin sofort ersichtlich, dass die Beziehung

$$L + H = p\dot{q} \quad (6.9)$$

gilt. Anders ausgedrückt: wir erhalten die Funktion $H(p)$ aus der Lagrange-funktion $L(\dot{q})$ über die **Legendretransformation**

$$H(p) = p\dot{q} - L(\dot{q}). \quad (6.10)$$

Wir berechnen nun noch den Anstieg der Funktion $H(p)$, indem wir Gl. (6.10) nach p differenzieren und beachten, dass die Lagrange-funktion über $L = L(\dot{q}(p))$ indirekt vom Impuls p abhängt. Damit wird

$$\frac{\partial H(p)}{\partial p} = \frac{\partial(p\dot{q}(p))}{\partial p} - \frac{\partial L(\dot{q}(p))}{\partial p} = \dot{q} + p \frac{\partial \dot{q}}{\partial p} - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{\partial \dot{q}}{\partial p} = \dot{q}. \quad (6.11)$$

Es gelten also wie gefordert die symmetrischen Beziehungen

$$p = \frac{\partial L(\dot{q})}{\partial \dot{q}} \Leftrightarrow \dot{q} = \frac{\partial H(p)}{\partial p} \quad (6.12)$$

und es lässt sich analog die Funktion $L(\dot{q})$ aus der Funktion $H(p)$ durch eine Legendretransformation ableiten.

Hängt die Lagrange-funktion von mehreren generalisierten Koordinaten und den dazugehörigen Geschwindigkeiten ab, so verallgemeinert sich die Legendretransformation (6.10) zu

$$H(p_1, \dots, p_f) = \sum_{\alpha=1}^f p_\alpha \dot{q}_\alpha - L(\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f). \quad (6.13)$$

Wir können also die Legendretransformation symbolisch auch so formulieren:

$$F(\text{neue Variable}) = \prod (\text{alte Variable})(\text{neue Variable}) - f(\text{alte Variable}) \quad (6.14)$$

Zum Schluss wollen wir noch die Frage beantworten, warum es nicht ausreicht, einfach eine Variablensubstitution in der Lagrange-funktion vorzunehmen. Dazu betrachten wir zwei Funktionen $L_1(\dot{q}) = a\dot{q}^2$ und $L_2(\dot{q}) = a(\dot{q}+b)^2$. Die zu diesen Lagrange-funktionen gehörenden generalisierten Impulse sind gerade $p_1 = 2a\dot{q}$ und $p_2 = 2a(\dot{q}+b)$. Durch Einsetzen in die Lagrange-funktionen L_1 und L_2 folgt, dass die resultierenden Funktionen

$$H_1(p_1) = \frac{p_1^2}{4a}, \quad H_2(p_2) = \frac{p_2^2}{4a} \quad (6.15)$$

identisch sind. Es gibt also keine Möglichkeit, aus der Kenntnis der Funktionen H_1 und H_2 eindeutig auf eine der Lagrange-funktionen L_1 oder L_2 zurückzuschließen.

6.1.3 Beispiel: freier Massenpunkt

Als elementares Beispiel betrachten wir die Lagrangefunktion eines freien Teilchens, $L = m\dot{\mathbf{q}}^2/2$. Diese Funktion erfüllt das Kriterium der Konvexität, das heisst, ihre zweiten Ableitungen $\partial^2 L/\partial\dot{q}_i^2$ sind positiv. Die generalisierten Impulse sind

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = m\dot{q}_i \quad (6.16)$$

und damit wie erwartet identisch zu den kinetischen Impulsen. Die Legendretransformation führt dann zu

$$H(\mathbf{p}) = \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{q}} - L(\dot{\mathbf{q}}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}. \quad (6.17)$$

6.1.4 Beispiel: Massenpunkt in einem Potential

Als zweites elementares Beispiel nehmen wir ein Teilchen an, das sich in einem Potential $U(\mathbf{q})$ bewegt. Die Lagrangefunktion für diesen Massenpunkt ist also

$$L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = T - U = \frac{m}{2}\dot{\mathbf{q}}^2 - U(\mathbf{q}). \quad (6.18)$$

Ihre Legendretransformierte ist dann

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{q}} - L(\dot{\mathbf{q}}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{q}) = T + U. \quad (6.19)$$

Sie wird also gerade zur Gesamtenergie $T + U$ des Massenpunktes.

6.1.5 Beispiel: Elektron in einem elektromagnetischen Feld

Ausgehend von der Lagrangefunktion

$$L = \frac{m}{2}\dot{\mathbf{r}}^2 + e\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{r}} - e\phi, \quad (6.20)$$

und den generalisierten Impulsen $p_i = m\dot{x}_i + eA_i$ folgt für die generalisierten Geschwindigkeiten

$$x_i = \frac{p_i - eA_i}{m} \quad (6.21)$$

und damit für die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2}{2m} + eU. \quad (6.22)$$

Die so erhaltene Hamiltonfunktion beschreibt die Wechselwirkung eines Elektrons mit dem elektromagnetischen Feld in **minimaler Kopplung**. Dieser Begriff rührt daher, dass in einer relativistisch kovarianten Theorie diese Art der Kopplung diejenige mit der niedrigsten Zahl von Feldern und deren Ableitungen darstellt, die den Anforderungen hinsichtlich Kovarianz und (in einer Quantentheorie) Renormierbarkeit genügt.

6.1.6 Die kanonischen Gleichungen

Die Lagrangefunktion L führt zu Bewegungsgleichungen, in denen die generalisierten Koordinaten q_α zusammen mit den generalisierten Geschwindigkeiten \dot{q}_α auftreten. Im Hamilton-Formalismus werden die kanonisch konjugierten Variablen q_α und p_α als Variablenpaare hergenommen. Wir berechnen nun die partiellen Ableitungen der Hamiltonfunktion $H(q_\alpha, p_\alpha, t)$ nach ihren Variablen, wobei wir sowohl die Lagrangegleichungen als auch die Definition der generalisierten Impulse verwenden:

$$\frac{\partial H}{\partial q_\alpha} = \sum_{\beta=1}^f p_\beta \frac{\partial \dot{q}_\alpha}{\partial q_\beta} - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} - \sum_{\beta=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\beta} \frac{\partial \dot{q}_\beta}{\partial q_\alpha} = -\frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = -\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} = -\dot{p}_\alpha, \quad (6.23)$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_\alpha} = \sum_{\beta=1}^f \frac{\partial \dot{q}_\beta}{\partial p_\alpha} p_\beta + \dot{q}_\alpha - \sum_{\beta=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\beta} \frac{\partial \dot{q}_\beta}{\partial p_\alpha} = \dot{q}_\alpha, \quad (6.24)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \sum_{\beta=1}^f \frac{\partial \dot{q}_\beta}{\partial t} p_\beta - \sum_{\beta=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\beta} \frac{\partial \dot{q}_\beta}{\partial t} - \frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}. \quad (6.25)$$

Wenn also die Hamiltonfunktion bekannt ist, kann die Zeitableitung der kanonischen Variablen q_α und p_α aus den **Hamiltonschen oder kanonischen Gleichungen** (6.23) und (6.24),

$$\dot{q}_\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}, \quad \dot{p}_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha} \quad (6.26)$$

bestimmt werden. Die Hamiltonschen Gleichungen (6.26) sind, im Gegensatz zu den f Lagrangegleichungen, Differentialgleichungen 1. Ordnung für die $2f$ kanonischen Variablen q_α und p_α . Wir haben also effektiv erreicht, einen Satz von f Differentialgleichungen 2. Ordnung in $2f$ Differentialgleichungen 1. Ordnung zu überführen. Die kanonischen Gleichungen beschreiben die Bewegung des Systems im abstrakten **Phasenraum** der $2f$ kanonisch konjugierten Variablen q_α und p_α .

Gleichung (6.25) ist Ausdruck des Energiesatzes. Aus unseren Betrachtungen zur Symmetrie der Lagrangefunktion unter zeitlichen Translationen wissen wir, dass für die Größe

$$\sum_{\alpha=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \dot{q}_\alpha - L \equiv H \quad (6.27)$$

die Relation

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{\partial L}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t} \quad (6.28)$$

gilt. Das heisst, dass die Hamiltonfunktion die Interpretation der **Gesamtenergie** des Systems besitzt, wenn sie nicht explizit von der Zeit abhängt. Die obige Relation wollen wir noch direkt unter Verwendung der Hamiltonschen Gleichungen nachprüfen:

$$\frac{dH}{dt} = \sum_{\alpha=1}^f \left(\underbrace{\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}}_{-\dot{p}_\alpha} \dot{q}_\alpha + \underbrace{\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}}_{\dot{q}_\alpha} \dot{p}_\alpha \right) + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}. \quad (6.29)$$

Hängt die Hamiltonfunktion nicht explizit von der Zeit ab, ist die eine Erhaltungsgröße,

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0 \quad \rightsquigarrow \quad \frac{dH}{dt} = 0 \quad \rightsquigarrow \quad H = \text{const.}, \quad (6.30)$$

nämlich die Gesamtenergie $H = T + U$ des Massenpunktsystems.

Wenn die Lagrangefunktion von einer generalisierten Koordinate q_α nicht abhängt, dann ist q_α eine zyklische Koordinate. Dann hängt auch die Hamiltonfunktion nicht von q_α ab und der dazugehörige Impuls p_α ist nach den kanonischen Gleichungen (6.26) eine Erhaltungsgröße,

$$\dot{p}_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha} = 0 \quad \rightsquigarrow \quad p_\alpha = \text{const.} \quad (6.31)$$

Beispiel: Harmonischer Oszillator

Das Standardbeispiel für die Anwendung der kanonischen Gleichungen ist wie immer der eindimensionale harmonische Oszillator mit Masse m und Eigenfrequenz ω_0 . Wir beginnen mit dessen Lagrangefunktion

$$L(q, \dot{q}, t) = \frac{m}{2} \dot{q}^2 - \frac{m}{2} \omega_0^2 q^2 \quad (6.32)$$

und berechnen zunächst den generalisierten Impuls zu

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q}. \quad (6.33)$$

Eine Legendretransformation führt zu der Hamiltonfunktion

$$H(q, p, t) = p\dot{q} - L(q, \dot{q}, t) = \frac{p^2}{m} - \left(\frac{p^2}{2m} - \frac{m}{2} \omega_0^2 q^2 \right) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega_0^2 q^2. \quad (6.34)$$

Die kanonischen Gleichungen lauten demnach

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -m\omega_0^2 q. \quad (6.35)$$

Diese löst man, indem man die eine der beiden Gleichungen noch einmal nach der Zeit differenziert und in die andere Gleichung einsetzt. Damit ergibt sich beispielsweise

$$\ddot{q} = \frac{\dot{p}}{m} = -\omega_0^2 q \quad \rightsquigarrow \quad \ddot{q} + \omega_0^2 q = 0 \quad (6.36)$$

und analog dazu

$$\ddot{p} = -m\omega_0^2 \dot{q} = \omega_0^2 p \quad \rightsquigarrow \quad \ddot{p} + \omega_0^2 p = 0. \quad (6.37)$$

Wir finden also sowohl für den Ort als auch den Impuls dieselbe Differentialgleichung, die aber nicht unabhängig voneinander gelöst werden können. Schliesslich müssen auch die kanonischen Gleichungen erfüllt bleiben. Lösen wir also eine der beiden Differentialgleichungen und schreiben beispielsweise die Lösung für die Koordinate in der Form

$$q(t) = A \sin(\omega_0 t + \varphi), \quad (6.38)$$

dann muss wegen $\dot{q} = p/m$ für den Impuls

$$p(t) = m\dot{q}(t) = m\omega_0 A \cos(\omega_0 t + \varphi) \quad (6.39)$$

gelten. Das ist aber vernünftig, da die beiden kanonischen Gleichungen durch die Angabe jeweils einer Anfangsbedingung eindeutig lösbar sind.

6.1.7 Kanonische Gleichungen aus dem Hamilton-Prinzip

Es ist natürlich auch möglich, die kanonischen Gleichungen direkt aus dem Hamilton-Prinzip abzuleiten, ohne explizit die Lagrangegleichungen bemühen zu müssen. Dazu ersetzen wir in der Lagrangefunktion $L(q_\alpha, \dot{q}_\alpha, t)$ die generalisierten Geschwindigkeiten \dot{q}_α durch Variablen k_α . Zusammen mit den generalisierten Koordinaten q_α sind das genau $2f$ Variable, nach denen das Wirkungsintegral zu minimieren ist,

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt L(q_\alpha, k_\alpha, t) = 0. \quad (6.40)$$

Die f Nebenbedingungen

$$\dot{q}_\alpha - k_\alpha = 0, \quad \alpha = 1, \dots, f \quad (6.41)$$

müssen mithilfe von Lagrangeschen Multiplikatoren λ_α in die Variationsaufgabe einbezogen werden. Dazu definieren wir eine erweiterte Lagrangefunktion

$$\Phi(q_\alpha, k_\alpha, \dot{q}_\alpha, t) = L(q_\alpha, k_\alpha, t) + \sum_{\alpha=1}^f \lambda_\alpha (\dot{q}_\alpha - k_\alpha) \quad (6.42)$$

und lösen das verallgemeinerte Variationsproblem

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt \Phi(q_\alpha, k_\alpha, \dot{q}_\alpha, t) = 0, \quad (6.43)$$

wobei die q_α und k_α als unabhängig zu variierende Funktionen anzusehen sind. Variation nach k_α liefert die Euler-Lagrange-Gleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \Phi}{\partial \dot{k}_\alpha} - \frac{\partial \Phi}{\partial k_\alpha} = \lambda_\alpha - \frac{\partial L}{\partial k_\alpha} = 0 \quad (6.44)$$

und damit die Lagrangeschen Multiplikatoren als

$$\lambda_\alpha = \frac{\partial L}{\partial k_\alpha}. \quad (6.45)$$

Setzen wir die Multiplikatoren in Gl. (6.42) ein,

$$\Phi(q_\alpha, k_\alpha, \dot{q}_\alpha, t) = L(q_\alpha, k_\alpha, t) + \sum_{\alpha=1}^f \frac{\partial L}{\partial k_\alpha} (\dot{q}_\alpha - k_\alpha), \quad (6.46)$$

so führt dies auf eine Variationsaufgabe für die $2f$ Funktionen $q_\alpha(t)$ und $k_\alpha(t)$ ohne Nebenbedingungen. Nun führen wir die Funktionen

$$p_\alpha = \frac{\partial L}{\partial \dot{k}_\alpha} \quad (6.47)$$

ein, mit deren Hilfe die k_α ausgedrückt werden können, $k_\alpha = k_\alpha(q_\beta, p_\beta, t)$, und damit die q_α und p_α als unabhängig zu variierende Funktionen aufgefasst werden können. Nun führen wir noch die Hamiltonfunktion

$$H(q_\alpha, p_\alpha, t) = \sum_{\alpha=1}^f p_\alpha k_\alpha(q_\beta, p_\beta, t) - L[q_\alpha, k_\alpha(q_\beta, p_\beta, t)] \quad (6.48)$$

ein, so dass die erweiterte Lagrangefunktion in

$$\Phi(q_\alpha, p_\alpha, \dot{q}_\alpha, t) = \sum_{\alpha=1}^f p_\alpha \dot{q}_\alpha - H(q_\alpha, p_\alpha, t) \quad (6.49)$$

übergeht. Die Euler–Lagrangeschen Gleichungen liefern dann

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \Phi}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial \Phi}{\partial q_\alpha} = \dot{p}_\alpha + \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} = 0, \quad (6.50)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \Phi}{\partial \dot{p}_\alpha} - \frac{\partial \Phi}{\partial p_\alpha} = -\dot{q}_\alpha + \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} = 0, \quad (6.51)$$

was genau die kanonischen Gleichungen sind. Diese Herleitung zeigt, dass die kanonischen Gleichungen direkt aus dem Wirkungsprinzip folgen, wenn man das Wirkungsintegral mit der Lagrangefunktion $L(q_\alpha, p_\alpha, \dot{q}_\alpha, t)$ unabhängig nach q_α und p_α variiert.

6.2 Der Phasenraum

Die kanonisch konjugierten Variablen q_α und p_α , also die generalisierten Koordinaten und Impulse, beschreiben vollständig den Zustand eines (mechanischen) Massenpunktsystems. Das heisst, sind zu einem Zeitpunkt $t = t_0$ die Werte aller generalisierten Koordinaten $q_\alpha(t_0)$ und Impulse $p_\alpha(t_0)$ bekannt, so sind durch die kanonischen Gleichungen auch ihre Werte und damit der Zustand des Systems zu jedem beliebigen früheren oder späteren Zeitpunkt bekannt. Die Zeitentwicklung der generalisierten Koordinaten und Impulse

wird im **Phasenraum** dargestellt. Jeder Punkt im Phasenraum repräsentiert dabei genau einen Zustand des Systems.

Der Phasenraum eines freien Massenpunktes in drei Dimensionen ist also sechsdimensional. Im Gegensatz dazu ist der **Konfigurationsraum** nur der Raum, der von den generalisierten Koordinaten aufgespannt wird, im Fall eines freien Massenpunktes ist dieser dreidimensional. Im allgemeinen Fall eines Massenpunktsystems mit f Freiheitsgraden ist der Konfigurationsraum f -dimensional. Um die Bewegung des Systems (die Bahnkurve) darzustellen, muss zum Konfigurationsraum noch die Zeitachse hinzugefügt und zum $f+1$ -dimensionalen Ereignisraum erweitert werden. Der Phasenraum hingegen ist $2f$ -dimensional. Wird zu diesem Raum noch die Zeitachse hinzugefügt, wird dieser zum **Zustandsraum**, dem allgemeinsten Raum, in die Dynamik eines Massenpunktsystems beschrieben werden kann. Alle anderen Räume sind Projektionen auf bestimmte Unterräume (Ebenen oder Achsen).

6.2.1 Beispiel: Harmonischer Oszillator in einer Dimension

Als Beispiel für die Darstellung der Bewegung in den unterschiedlichen Räumen betrachten wir einen harmonischen Oszillator der Masse m , der Frequenz ω_0 und der Energie E . Lagrangefunktion und Hamiltonfunktion für den Oszillator sind

$$L(q, \dot{q}) = \frac{m}{2} \dot{q}^2 - \frac{m}{2} \omega_0^2 q^2, \quad H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega_0^2 q^2 = E. \quad (6.52)$$

Lösung der Bewegungsgleichungen ergibt

$$\begin{aligned} q(t) &= A \sin(\omega_0 t + \alpha), & A &= \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2}} \\ p(t) = m\dot{q}(t) &= B \cos(\omega_0 t + \alpha), & B &= m\omega_0 A = \sqrt{2mE}. \end{aligned} \quad (6.53)$$

Im Konfigurationsraum wird der harmonische Oszillator durch die Strecke $|q| \leq A$ abgebildet (siehe linkes Diagramm in Abb. 6.2). Im Ereignisraum (mittleres Diagramm in Abb. 6.2) wird, nach Angabe von zwei Anfangsbedingungen bzw. Randbedingungen für die Koordinate q eine Bahnkurve ausgewählt, die die typische Schwingungsbewegung darstellt. Im Phasenraum (rechtes Bild in Abb. 6.2) werden die durch den harmonischen Oszillator

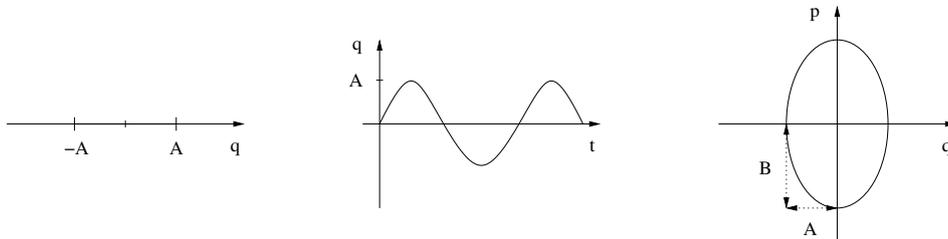


Abbildung 6.2: Darstellung des eindimensionalen harmonischen Oszillators im Konfigurationsraum (links), Ereignisraum (Mitte) und Phasenraum (rechts).

erreichbaren Punkte (also die Trajektorie) durch eine Ellipse

$$\underbrace{\frac{p^2}{2mE}}_{B^2} + \underbrace{\frac{q^2}{2E}}_{m\omega_0^2 A^2} = 1 \quad (6.54)$$

mit den energieabhängigen Halbachsen A und B charakterisiert. Unterschiedliche Energien des Oszillators führt zu Ellipsen unterschiedlicher Größe im Phasenraum. Im Zustandsraum würde dann eine spiralförmige Bahn $\mathbf{x}(t) = (q(t), p(t))$ durchlaufen.

6.2.2 Zustand eines physikalischen Systems

Wir haben schon den Begriff des **Zustandes** eines physikalischen Systems verwendet, dem wir nun eine exakte Bedeutung zukommen lassen wollen. Wir verstehen unter dem Zustand ψ eines Systems den minimalen Satz von physikalischen Größen, der notwendig ist, um alle physikalischen Eigenschaften des Systems ableiten zu können. Am Beispiel des harmonischen Oszillators haben wir gesehen, dass einzig die Angabe der generalisierten Koordinaten q zu einem Zeitpunkt $t = t_0$ offensichtlich nicht ausreicht. Allerdings reicht die Angabe von generalisierter Koordinate und Impuls aus, die Angabe von beiden ist der minimale Satz von Größen, der zur Beschreibung des Oszillators notwendig und hinreichend ist.

Jedem Zustand, in dem sich ein physikalisches System befinden kann, wird eindeutig ein Punkt im Phasenraum zugeordnet. Aus dieser Eindeutigkeit folgt zudem, dass sich Trajektorien im Phasenraum niemals überkreuzen

können, da an den Schnittpunkten die Zuordnung des Zustandes zu einer Trajektorie mehrdeutig würde. Letztere Aussage gilt offensichtlich nicht für den Konfigurationsraum, also die Projektion des Phasenraums auf die Ortsvariablen. Wie wir am Beispiel des Oszillators gesehen haben, sagt die Angabe der Koordinate q nichts darüber aus, mit welcher Geschwindigkeit oder welchem Impuls sich der Massenpunkt bewegt, die Zuordnung zu einer Trajektorie ist also im Konfigurationsraum nicht eindeutig. Für die Projektionen des Phasenraums auf die Orts- und Impulsvariablen werden auch manchmal (insbesondere in der Quantenmechanik und der statistischen Physik) die Begriffe Ortsraum und Impulsraum verwendet.

Die Definition des Zustands ψ eines Systems impliziert, dass auch dessen Zeitentwicklung $\psi(t)$ durch die Vorgabe eines solchen minimalen Satzes von physikalischen Größen zu einem beliebigen Zeitpunkt $t = t_0$ eindeutig festgelegt ist,

$$\psi_0 = \psi(t_0) \quad \rightsquigarrow \quad \psi(t) = \psi(t; \psi_0). \quad (6.55)$$

Wenn also eine einzige Anfangsbedingung ausreicht, um die Zeitentwicklung eines Zustands eindeutig zu bestimmen, muss sie durch eine Differentialgleichung erster Ordnung beschrieben werden,

$$\dot{\psi}(t) = F[\psi(t)]. \quad (6.56)$$

In der Mechanik wird der Zustand eines Systems durch Ort und Impuls charakterisiert, also muss

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = F[\mathbf{x}(t)], \quad \mathbf{x} = (q, p) \quad (6.57)$$

gelten. Die kanonischen Gleichungen (6.26) sind in der Tat in genau dieser Form.

6.2.3 Phasenraumanalyse

Der Begriff des Phasenraumes kann dahingehend erweitert werden, dass die zeitliche Evolution beliebiger Differentialgleichungen erster Ordnung in ihm dargestellt werden kann. In diesem Sinn ist der Phasenraum nicht mehr an die Existenz einer Hamiltonfunktion im Sinne einer erhaltenen Gesamtenergie, das heisst eines Potentials, gebunden. Eine grafische Darstellung aller möglichen Trajektorien (**Phasenraumportrait**) ermöglicht dann eine Visualisierung des globalen qualitativen Lösungsverhaltens eines (dynamischen) Systems.

Beispiel: gedämpfter harmonischer Oszillator Ein einfaches Beispiel aus der Mechanik, das diese Erweiterung demonstrieren soll, ist ein harmonischer Oszillator, dessen mechanische Gesamtenergie im Laufe der Zeit abnimmt. Das typische Verhalten einer Trajektorie eines Oszillators, dessen

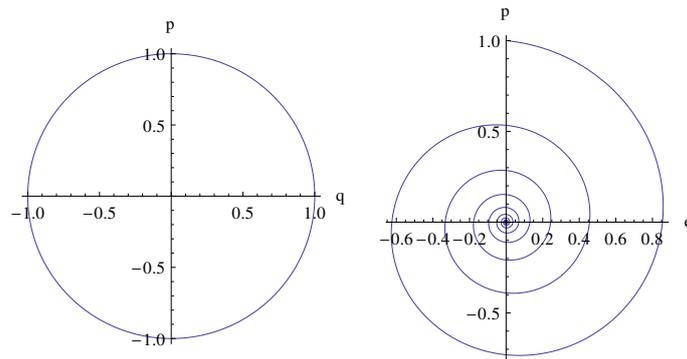


Abbildung 6.3: Typische Trajektorien eines ungedämpften (links) und exponentiell gedämpften (rechts) harmonischen Oszillators.

Gesamtenergie exponentiell wie $E(t) = E(0)e^{-\Gamma t}$ abfällt, ist im rechten Diagramm von Abb. 6.3 zu sehen. Im Gegensatz dazu ist im linken Diagramm der **periodische Orbit**, also die geschlossene Trajektorie, der ungedämpften harmonischen Schwingung dargestellt. Typisch für das Verhalten dissipativer Systeme ist die Abnahme des Abstandes naheliegender Trajektorien. Man spricht hier auch von der Abnahme des Phasenraumvolumens, das den Trajektorien zur Verfügung steht. Darauf werden wir später noch genauer eingehen.

Die Annahme einer exponentiellen Abnahme der Gesamtenergie ist sicherlich künstlich, so dass es Sinn macht, den gedämpften harmonischen Oszillator etwas genauer zu betrachten. Wir erinnern uns an die Bewegungsgleichung

$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} + \omega_0^2 x = 0 \quad (6.58)$$

mit der Dämpfungskonstante γ und der Eigenfrequenz ω_0 . Wir führen nun diese Differentialgleichung zweiter Ordnung auf ein gekoppeltes System von

zwei Differentialgleichungen erster Ordnung zurück,

$$\dot{x} = y, \quad (6.59)$$

$$\dot{y} = -\gamma y - \omega_0^2 x. \quad (6.60)$$

Die Variable y wäre also proportional zum kanonischen Impuls, wenn wir eine Lagrangefunktion hätten, aus der wir letzteren definieren könnten. In

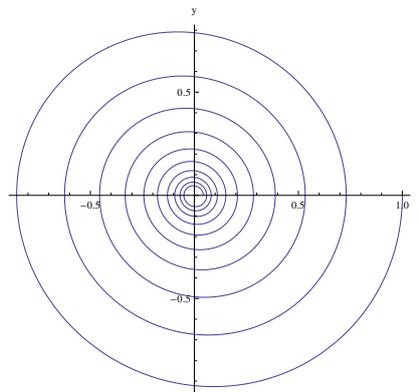


Abbildung 6.4: Phasenraumtrajektorie eines gedämpften harmonischen Oszillators.

Abb. 6.4 ist die Trajektorie für die Parameter $\gamma = 0.1$, $\omega_0 = 1$ und die Anfangsbedingungen $x(0) = 1$, $y(0) = 0$ dargestellt. Qualitativ ist die Lösung der Trajektorie in Abb. 6.3 sehr ähnlich. In der Tat haben wir früher die exakte Lösung des Gleichungssystems (6.59) als eine exponentiell gedämpfte Schwingung mit der Dämpfungskonstante γ erhalten, was unserer *ad hoc*-Annahme einer exponentiell fallenden Gesamtenergie recht gut entspricht.

Beispiel: van der Pol-Oszillator Dieses einfache Beispiel sollte erläutern, dass der Phasenraum zur Analyse beliebiger **dynamischer Systeme**, die Differentialgleichungen erster Ordnung $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$ genügen, geeignet ist. Ein interessantes Beispiel ist der van der Pol-Oszillator, der eine nichtlineare Erweiterung des gedämpften harmonischen Oszillators darstellt. Er wurde zuerst bei der Berechnung elektrischer Stromkreise mit Vakuumröhren aufgestellt und ist nun eines der Standardbeispiele nichtlinearer Dynamik. Die Differentialgleichung des van der Pol-Oszillators in Standardform lautet

$$\ddot{x} - \gamma(1 - x^2)\dot{x} + x = 0. \quad (6.61)$$

Der Dämpfungsparameter γ kennzeichnet hier sowohl die Stärke der Dämpfung als auch der Nichtlinearität. Ein äquivalentes System von Differentialgleichungen erster Ordnung (es gibt mehrere Formen) lautet

$$\dot{x} = y, \quad (6.62)$$

$$\dot{y} = \gamma(1 - x^2)y - x. \quad (6.63)$$

Für $\gamma = 0$ verschwinden sowohl Dämpfung als auch Nichtlinearität, und die Bewegung reduziert sich auf die eines harmonischen Oszillators. Für $\gamma > 0$ bewegt sich die Lösung auf einen **Grenzzzyklus** (engl.: limit cycle) zu. Das heisst, dass die Lösung bei vorgegebenen Anfangsbedingungen nach endlicher Zeit auf einem Orbit landet. Dabei sind beim van der Pol-Oszillator die Punkte im Phasenraum nahe des Ursprungs instabil, weit weg vom Ursprung ist das System aber gedämpft. Das Zulaufen auf den Grenzzzyklus

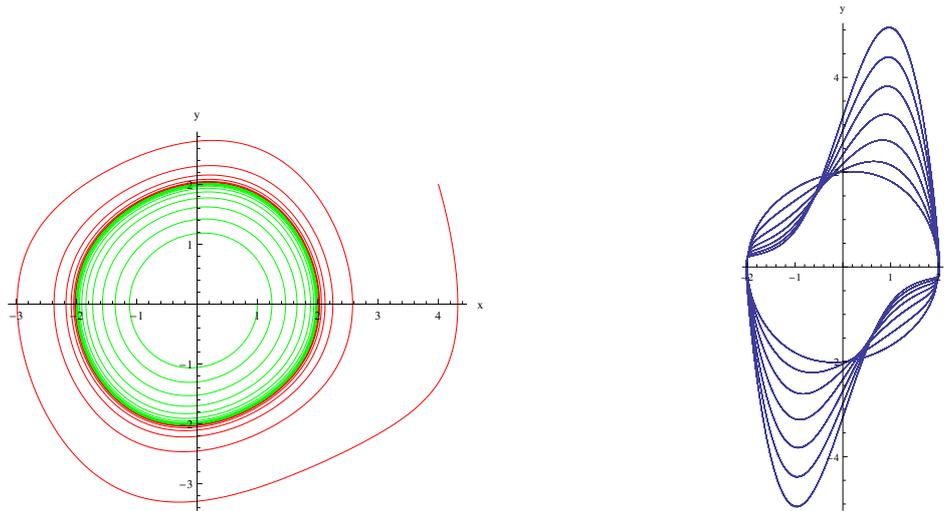


Abbildung 6.5: Zeitentwicklung des ungetriebenen van der Pol-Oszillators. Links: Trajektorien für Anfangsbedingungen $(x, y) = (1, 0)$ (grün) und $(x, y) = (4, 2)$ (rot) für $\gamma = 0.1$. Rechts: Entwicklung der Grenzzyklen für $\gamma = 0.1, 0.5, 1, 1.5, 2, 2.5, 3$. Der Grenzzyklus beginnt als Kreis für $\gamma \rightarrow 0$ und wird mit steigendem γ immer spitzer.

ist im linken Diagramm in Abb. 6.5 für unterschiedliche Anfangsbedingungen und $\gamma = 0.1$ dargestellt. Die Änderung der Grenzzyklen für wachsenden Dämpfungsparameter ist im rechten Diagramm in Abb. 6.5 gezeigt. Der

Grenzzzyklus beginnt als Kreis für $\gamma \rightarrow 0$ und wird mit steigendem γ immer spitzer.

6.2.4 Fluss im Phasenraum, Dissipation

Der van der Pol-Oszillator ist ein Beispiel für ein dynamisches System, das für beliebige Anfangsbedingungen auf eine spezielle Lösung, in diesem Fall einen Grenzzzyklus, zuläuft. Um dieses Verhalten genauer zu analysieren, betrachten wir das Phasenraumportrait, also eine Kollektion von Trajektorien mit unterschiedlichen Anfangsbedingungen. Das Phasenraumportrait enthält sowohl Informationen über das transiente als auch das asymptotische Verhalten der Lösungen eines Systems. In Analogie zur Flusslinien in der Hydrodynamik, bei der die Bewegung eines Testteilchens in einer Flüssigkeit nachvollzogen wird, oder auch der Elektrodynamik, beschreibt der **Fluss** im Phasenraum den zeitlichen Verlauf von Trajektorien, die von unterschiedlichen Anfangsbedingungen starten. In manchen Situationen ist es notwendig, den Fluss nur für positive (oder negative) Zeiten zu betrachten, so dass man dort von einem **Halbfluss** spricht.

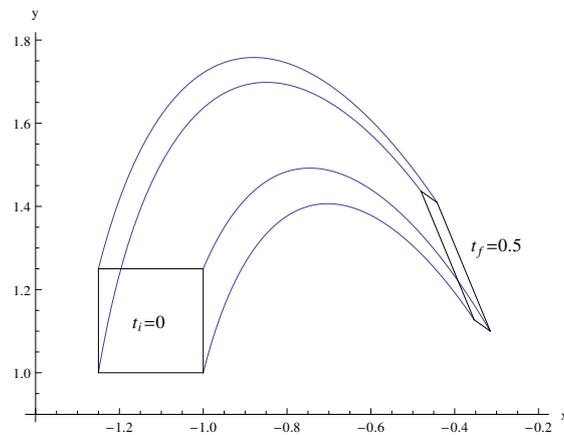


Abbildung 6.6: Vier Trajektorien des gedämpften harmonischen Oszillators für unterschiedliche Anfangsbedingungen. Die Zeitentwicklung verläuft von $t = 0$ bis $t = 0.5$.

Zur Illustration des Flusses im Phasenraum betrachten wir den gedämpften harmonischen Oszillator (6.59) mit den Parametern $\gamma = 4$ und $\omega_0^2 = 8$. In

Abb. 6.6 sind vier Trajektorien gezeigt, die bei $t = 0$ mit den Anfangsbedingungen $(x, y) = (-1, 1), (-1.25, 1), (-1.25, 1.25), (-1, 1.25)$ starten und bis $t = 0.5$ laufen. Das Gebiet, das die Trajektorien dabei einnehmen und durch die Vierecke symbolisiert werden, werden im Laufe der Zeit immer kleiner. Das heisst, bei der Zeitentwicklung des gedämpften harmonischen Oszillators nehmen die Endzustände $\psi(t_f)$ einen geringeren Platz (im allgemeinen ein geringeres Volumen) im Phasenraum ein als die Anfangszustände $\psi(t_i)$. Dies ist Ausdruck der **Dissipation** eines Systems.

Wir erhalten also durch unser Phasenraumbild eine weitere Interpretation des Begriffes der Dissipation, den wir noch etwas ausbauen wollen. Dazu betrachten wir einen allgemeinen Fluss im Phasenraum unter der Abbildung

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}). \quad (6.64)$$

Zu einem Zeitpunkt $t = t_i$ sei das Volumen, das eine gewisse Menge von Zuständen $\psi(t_i)$ im Phasenraum einnehmen, gerade V_i . Nach einer Zeit t_f werden von den Trajektorien andere Zustände $\psi(t_f)$ im Phasenraum erreicht, die ein Volumen V_f einnehmen. Ein dissipatives System ist dann dadurch ausgezeichnet, dass $V_f < V_i$ gilt. Flüsse im Phasenraum werden also in dissipative und konservative Flüsse eingeteilt, je nachdem, ob die lokalen Volumina im Phasenraum im Laufe der Zeit schrumpfen oder konstant bleiben.

Um zu unterscheiden, ob ein Fluss konservativ oder dissipativ ist, ziehen wir das Divergenzkriterium heran, das wir in der Vorlesung Mathematische Methoden kennengelernt haben. Zu jedem Zeitpunkt t betrachten wir die Menge der Punkte in einem (kleinen) Phasenraumvolumen V , das von der Oberfläche S begrenzt wird. Mit fortschreitender Zeit verändern die Punkte (Zustände) ihre Position im Phasenraum und damit ändern sich Volumen und Oberfläche. Nach einem Zeitintervall Δt hat sich das Phasenraumvolumen um den Betrag

$$\Delta V = (\dot{\mathbf{x}}\Delta t) \cdot \mathbf{n}\Delta S \quad (6.65)$$

verändert, wobei $\dot{\mathbf{x}}\Delta t$ die Änderung der Positionen der Punkte im Phasenraum, ΔS ein Flächenstück auf der Oberfläche des Volumens V und \mathbf{n} die nach außen gerichtete Oberflächennormale ist. Lassen wir die Größe der Flächenstücke ΔS gegen Null gehen und integrieren über die Oberfläche S , so erhalten wir

$$\Delta V = \Delta t \iint_S \dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{n} dS = \Delta t \iint_S \mathbf{f} \cdot \mathbf{n} dS = \Delta t \iiint_V (\nabla \cdot \mathbf{f}) dV. \quad (6.66)$$

Für ein infinitesimal kleines Phasenraumvolumen V gilt also

$$\frac{1}{V} \frac{dV}{dt} = \nabla \cdot \mathbf{f}. \quad (6.67)$$

Ein Fluss ist also dissipativ, wenn $\nabla \cdot \mathbf{f} < 0$ ist, und er ist konservativ, wenn $\nabla \cdot \mathbf{f} = 0$ ist. Mit anderen Worten, man erkennt ein dissipatives System daran, dass es Senken (singuläre Punkte) im Phasenraum besitzt.

Der gedämpfte harmonische Oszillator (6.59) kann in vektorieller Schreibweise auch als

$$\begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\omega_0^2 & -\gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (6.68)$$

geschrieben werden. Die Abbildung \mathbf{f} ist also eine Matrix, die den zweidimensionalen Vektor $\mathbf{x} = (x, y)$ auf einen anderen zweidimensionalen Vektor abbildet. Deren Divergenz berechnet sich zu

$$\nabla \cdot \mathbf{f} = \frac{\partial f_x}{\partial x} + \frac{\partial f_y}{\partial y} = -\gamma. \quad (6.69)$$

Bei Dämpfung $\gamma > 0$ ist also tatsächlich der Fluss dissipativ, und alle Trajektorien laufen auf den singulären Punkt $(x, y) = (0, 0)$, den **Attraktor** des Systems, zu, der die Senke der Abbildung \mathbf{f} darstellt.

Wir gehen nun wieder zurück zu mechanischen Systemen, die durch eine Hamiltonfunktion $H(q_\alpha, p_\alpha, t)$ beschrieben werden, und deren Zeitentwicklung durch die kanonischen Gleichungen

$$\dot{q}_\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}, \quad \dot{p}_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha} \quad (6.70)$$

bestimmt wird. Die Divergenz der Abbildung, die zu diesen Gleichungen führt, ist also

$$\nabla \cdot \mathbf{f} = \sum_{\alpha=1}^f \left[\frac{\partial}{\partial q_\alpha} \left(\frac{\partial H}{\partial p_\alpha} \right) + \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left(-\frac{\partial H}{\partial q_\alpha} \right) \right] = 0, \quad (6.71)$$

was aus der Vertauschbarkeit der Ableitungen für zweifach differenzierbare Funktionen H folgt. Das heisst, das Phasenraumvolumen in einem Hamiltonschen System ist immer erhalten. Diese Aussage der Erhaltung des Phasenraumvolumens nennt man auch **Liouville-Theorem**. Hamiltonsche Systeme bilden also eine Untermenge aller konservativen Systeme.

6.3 Die Poisson-Klammern

Die kanonischen Gleichungen (6.26) haben den Vorteil, dass sie bezüglich der generalisierten Koordinaten und Impulse sehr symmetrisch sind, abgesehen von dem Minuszeichen, weswegen die Gleichungen immer separat aufgeschrieben werden müssen. Wir werden nun eine mathematische Struktur kennenlernen, mit deren Hilfe die Bewegungsgleichungen in einheitlicher Form formuliert werden können. Diese Struktur zeigt auch die direkte Analogie zu den im vorigen Kapitel angeführten Überlegungen zu Flüssen im Phasenraum.

Jede physikalische Größe lässt sich als Funktion der generalisierten Koordinaten und Impulse und möglicherweise der Zeit ausdrücken,

$$F = F(q_\alpha, p_\alpha, t). \quad (6.72)$$

Wir stellen nun die Bewegungsgleichung für diese Größe auf und verwenden dabei die kanonischen Gleichungen (6.26),

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dt} &= \sum_{\alpha=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha + \frac{\partial F}{\partial p_\alpha} \dot{p}_\alpha \right) + \frac{\partial F}{\partial t} \\ &= \sum_{\alpha=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_\alpha} \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial F}{\partial p_\alpha} \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} \right) + \frac{\partial F}{\partial t}. \end{aligned} \quad (6.73)$$

Der erste Term auf der rechten Seite der Gleichung ist die sogenannte **Poisson-Klammer** der Funktionen F und H . Die Poisson-Klammer zweier Funktionen F und G ist definiert als

$$\{F, G\} = \sum_{\alpha=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_\alpha} \frac{\partial G}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial F}{\partial p_\alpha} \frac{\partial G}{\partial q_\alpha} \right) \quad (6.74)$$

und gilt für beliebige Funktionen der generalisierten Koordinaten und Impulse (also nicht nur für die Hamiltonfunktion H). Die Bewegungsgleichung einer physikalischen Größe F kann also in der kompakten Form

$$\frac{dF}{dt} = \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t} \quad (6.75)$$

geschrieben werden. Speziell für $F = q_\alpha$ bzw. $F = p_\alpha$ ergeben sich die kanonischen Gleichungen zu

$$\dot{q}_\alpha = \{q_\alpha, H\}, \quad \dot{p}_\alpha = \{p_\alpha, H\} \quad (6.76)$$

und nehmen eine symmetrische Form bezüglich der generalisierten Koordinaten und Impulse an.

Gleichzeitig stellen wir fest, dass die kanonischen Gleichungen in der Form (6.76) gerade die Form (6.64) eines dynamischen Systems annehmen. Die Abbildung \mathbf{f} ist dabei durch die Poisson-Klammern zu ersetzen,

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) := \{\mathbf{x}, H\} = \left[\sum_{\alpha=1}^f \left(\frac{\partial H}{\partial p_\alpha} \frac{\partial}{\partial q_\alpha} - \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \right) \right] \mathbf{x}. \quad (6.77)$$

Somit wird ersichtlich, dass die Poisson-Klammern den Fluss im Phasenraum der $\{q_\alpha, p_\alpha\}$ beschreiben und dass das Phasenraumvolumen dabei konstant bleibt, was wir im vorherigen Abschnitt explizit aus den kanonischen Gleichungen gezeigt haben.

Aus der Definition (6.74) der Poisson-Klammer folgen sofort einige wichtige Rechenregeln:

1. $\{F, G\} = -\{G, F\}$ (Antisymmetrie).
2. $\{c_1 F_1 + c_2 F_2, G\} = c_1 \{F_1, G\} + c_2 \{F_2, G\}$ (Linearität).
3. $\{c, G\} = 0 \quad \forall G(q_\alpha, p_\alpha)$ (Nullelement).
4. $\{F, G_1 G_2\} = G_1 \{F, G_2\} + \{F, G_1\} G_2$ (Produktregel). Diese Regel ist einfach einzuprägen, wenn man beachtet, dass der erste Faktor in einem Produkt vor die Klammer, der zweite Faktor hinter die Klammer gezogen wird.
5. $\{F_1, \{F_2, F_3\}\} + \{F_3, \{F_1, F_2\}\} + \{F_2, \{F_3, F_1\}\} = 0$ (Jacobi-Identität).

Alle diese Rechenregeln überprüft man durch Einsetzen in die Definition (6.74) und direktes Nachrechnen. Beachtet man, dass die generalisierten Koordinaten und Impulse unabhängig voneinander sind,

$$\frac{\partial q_\alpha}{\partial q_\beta} = \delta_{\alpha\beta}, \quad \frac{\partial p_\alpha}{\partial p_\beta} = \delta_{\alpha\beta}, \quad \frac{\partial q_\alpha}{\partial p_\beta} = 0, \quad \frac{\partial p_\alpha}{\partial q_\beta} = 0, \quad (6.78)$$

so folgen die weiteren Regeln

$$6. \quad \{F, p_\alpha\} = \frac{\partial F}{\partial q_\alpha} \quad \text{und} \quad \{F, q_\alpha\} = -\frac{\partial F}{\partial p_\alpha}.$$

Aus der letzten Regel folgen mit $F = H$ sofort die kanonischen Gleichungen. Ebenso folgen die **fundamentalen Poisson-Klammern** der kanonischen Variablen untereinander zu

$$\{q_\alpha, p_\beta\} = \delta_{\alpha\beta}, \quad \{q_\alpha, q_\beta\} = 0, \quad \{p_\alpha, p_\beta\} = 0. \quad (6.79)$$

6.3.1 Integrale der Bewegung

Um zu sehen, wie sich Integrale der Bewegung in der Sprache der Poisson-Klammern ausdrücken, gehen wir zurück zu der Bewegungsgleichung (6.75) einer physikalischen Größe F . Eine Erhaltungsgröße und damit ein Integral der Bewegung ist eine solche Größe, die sich im Laufe der Zeit nicht ändert. Deswegen muss gelten, dass

$$\{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t} = 0. \quad (6.80)$$

Wenn insbesondere F nicht explizit von der Zeit abhängt, lautet die Bedingung dafür, dass F eine Erhaltungsgröße darstellt,

$$\{F, H\} = 0. \quad (6.81)$$

Die Poisson-Klammer mit der Hamiltonfunktion des Systems muss also verschwinden. Für $F = H$ folgt außerdem

$$\frac{dH}{dt} = \{H, H\} + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}, \quad (6.82)$$

was wir schon in Gl. (6.28) gefunden hatten.

Weiterhin gilt, dass die Poisson-Klammer zweier Integrale der Bewegung wieder ein Integral der Bewegung ist. Wenn F und G die erhaltenen Größen sind, dann gilt für sie

$$\{H, F\} = \frac{\partial F}{\partial t}, \quad \{H, G\} = \frac{\partial G}{\partial t}. \quad (6.83)$$

Wir benutzen nun die Jacobi-Identität und finden

$$\begin{aligned} 0 &= \{F, \{G, H\}\} + \{G, \{H, F\}\} + \{H, \{F, G\}\} \\ &= -\left\{F, \frac{\partial G}{\partial t}\right\} + \left\{G, \frac{\partial F}{\partial t}\right\} + \{H, \{F, G\}\}. \end{aligned} \quad (6.84)$$

Aus der Linearität der Poisson-Klammer und der Produktregel der Differentiation folgt damit

$$\{H, \{F, G\}\} = \frac{\partial}{\partial t} \{F, G\} \quad (6.85)$$

und somit

$$\frac{d}{dt} \{F, G\} = 0. \quad (6.86)$$

Diese Aussage wird auch als **Poisson-Theorem** bezeichnet. Mithilfe dieses Satzes lassen sich unter Umständen aus der Kenntnis von Erhaltungsgrößen F und G neue Integrale der Bewegung erzeugen. Dies funktioniert aber nur, wenn die Poisson-Klammer zwischen F und G nicht gerade eine Konstante oder eine Funktion von F und G selbst ist. Trifft keine der beiden Bedingungen zu, hat man ein neues Integral der Bewegung gefunden und damit einen weiteren Schritt in Richtung Lösung der Bewegungsgleichungen getan.

6.3.2 Symplektische Struktur des Phasenraums

Zum Schluss dieses Kapitel machen wir noch einige mathematische Aussagen zur Struktur des Phasenraums und der Beziehung der Poisson-Klammer zu diesem. In der Mathematik wird eine **symplektische Form** $\beta \mapsto V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ auf einem endlichdimensionalen Vektorraum V mit den folgenden Eigenschaften eingeführt:

1. β ist eine bilineare alternierende Abbildung. Seien $v, w \in V$, dann gilt immer $\beta(v, w) = -\beta(w, v)$.
2. β ist nicht ausgeartet, das heisst, bezüglich irgendeiner Basis (b_1, \dots, b_n) von V ist die Matrix $B = (\beta(b_i, b_j))$ invertierbar, also $\det B \neq 0$.

Als einfaches Beispiel betrachten wir einen Vektorraum mit $\dim V = 2$. Sei (b_1, b_2) eine Basis in V . Dann gilt $\beta(b_1, b_1) = \beta(b_2, b_2) = 0$ und $\beta(b_1, b_2) = -\beta(b_2, b_1) = 1$. Das bedeutet, dass β bezüglich dieser Basis die Form

$$\beta(x_1 b_1 + x_2 b_2, y_1 b_1 + y_2 b_2) = x_1 y_2 - x_2 y_1 \quad (6.87)$$

hat und die Matrix B gerade

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.88)$$

wird. Für einen Vektorraum mit $\dim V = 2n$ gilt die Verallgemeinerung

$$\beta(x, y) = \sum_{i=1}^n (x_i y_{n+i} - x_{n+i} y_i) \quad \text{für} \quad x = \sum_{i=1}^n x_i b_i, \quad y = \sum_{i=1}^n y_i b_i \quad (6.89)$$

mit der symplektischen Matrix

$$B = \begin{pmatrix} 0 & E_n \\ -E_n & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.90)$$

Angewandt auf die kanonisch konjugierten Variablen, die wir in einem Vektor $\mathbf{x} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})^T$ zusammenfassen, lautet die symplektische Form

$$\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbf{q} \cdot \mathbf{p}' - \mathbf{q}' \cdot \mathbf{p} \quad (6.91)$$

und die symplektische Matrix wird in diesem Fall mit

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 0 & E_n \\ -E_n & 0 \end{pmatrix} \quad (6.92)$$

bezeichnet.

Als nächste führen wir den Begriff des **symplektischen Gradienten** ein. Der gewöhnliche Gradient einer Funktion $f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ ist ja gerade

$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial q_n}, \frac{\partial f}{\partial p_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial p_n} \right)^T. \quad (6.93)$$

Der symplektische Gradient ist dann definiert als

$$\nabla_{\Sigma} f := \Sigma \cdot \nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial p_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial p_n}, -\frac{\partial f}{\partial q_1}, \dots, -\frac{\partial f}{\partial q_n} \right)^T. \quad (6.94)$$

Die übliche Notation des symplektischen Gradienten ist als Vektorfeld $\mathbf{X}_f := \nabla_{\Sigma} f$, das wir in Kurzform als

$$\mathbf{X}_f = \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}}, -\frac{\partial f}{\partial \mathbf{q}} \right) \quad (6.95)$$

schreiben können.

Die kanonischen Gleichungen sind mit den obigen Definitionen aber gerade

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{X}_N(\mathbf{x}). \quad (6.96)$$

Diese Gleichung ist uns schon bei der Beschreibung dynamischer Systeme begegnet. Sie besagt, dass der symplektische Gradient den Fluss im Phasenraum beschreibt und damit der Phasenraum selbst diese symplektische Struktur besitzt. Die Poisson-Klammer zweier physikalischer Größen F und G ist damit aber

$$\{F, G\} = \omega(\mathbf{X}_F, \mathbf{X}_G), \quad (6.97)$$

also die symplektische Form der symplektischen Gradienten der Größen F und G . Die Eigenschaften der Poisson-Klammer (Antisymmetrie \equiv bilinear alternierend, Jacobi-Identität, Nullelement, Produktregel) folgen dann durch direktes Nachrechnen aus den symplektischen Eigenschaften.

6.3.3 Ausblick: Quantenmechanik

Aus allem vorher Gesagten folgt, dass die Form der Poisson-Klammer nicht fundamental für die Ableitung der Bewegung in einem Phasenraum ist. Insbesondere kann man in jedem beliebigen Vektorraum mit einer symplektischen Struktur eine Klammer definieren, die die oben genannten Eigenschaften besitzt. Eine spezielle Realisierung einer solchen Struktur betrifft lineare Operatoren \hat{F} und \hat{G} , die auf Elemente eines komplexen Hilbertraumes der quadratisch integrierbaren Funktionen $L_2(a, b)$ wirken und durch quadratische Matrizen dargestellt werden können. Die Klammer in diesem Raum ist dann durch den **Kommutator**

$$[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} \quad (6.98)$$

(multipliziert mit einem Faktor $(i\hbar)^{-1}$) gegeben. Da die Reihenfolge der Anwendung von Operatoren nicht beliebig ist, ist der Kommutator zweier Operatoren typischerweise wieder ein Operator und nicht Null. Man kann zeigen, dass der Kommutator dieselben Rechenregeln erfüllt wie die Poisson-Klammer. Die Realisierung der Klammer durch den Kommutator (6.98) ist ein wichtiger Bestandteil bei der Entwicklung der Quantenmechanik.

Mithilfe der allgemeinen Eigenschaften der Klammer können nun Bewegungsgleichungen gelöst werden, ohne jemals die konkrete Realisierung der Klammer (Poisson-Klammer oder Kommutator) verwendet zu haben. Als Beispiel betrachten wir wieder den eindimensionalen harmonischen Oszillator, dessen Hamiltonfunktion gerade

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega_0^2 q^2 \quad (6.99)$$

ist. Die Bewegungsgleichungen sind also

$$\dot{p} = \{p, H\} \quad \text{und} \quad \dot{q} = \{q, H\}, \quad (6.100)$$

wobei das Symbol $\{\dots, \dots\}$ jetzt eine abstrakte Klammer bezeichnen soll. Unter Verwendung der fundamentalen Klammerrelationen folgt dann

$$\begin{aligned} \dot{p} &= \frac{1}{2m} \{p, p^2\} + \frac{m\omega_0^2}{2} \{p, q^2\} \\ &= \frac{1}{2m} (p\{p, p\} + \{p, p\}p) + \frac{m\omega_0^2}{2} (q\{p, q\} + \{p, q\}q) \\ &= -m\omega_0^2 q, \end{aligned} \quad (6.101)$$

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{1}{2m} \{q, p^2\} + \frac{m\omega_0^2}{2} \{q, q^2\} \\ &= \frac{1}{2m} (p\{q, p\} + \{q, p\}p) + \frac{m\omega_0^2}{2} (q\{q, q\} + \{q, q\}q) \\ &= \frac{p}{m}, \end{aligned} \quad (6.102)$$

ohne dass wir jemals die konkrete Form der Poisson-Klammer verwendet haben. Nach unseren Überlegungen müssen dann auch die Bewegungsgleichungen des harmonischen Oszillators in der (Heisenbergschen) Quantenmechanik

$$\dot{\hat{p}} = -m\omega_0^2 \hat{q}, \quad \dot{\hat{q}} = \frac{\hat{p}}{m} \quad (6.103)$$

lauten, wenn man \hat{q} und \hat{p} als Operatoren nach der Vorschrift der Quantenmechanik interpretiert. Dies ist Teil des sogenannten **Korrespondenzprinzips** der Quantenmechanik, das eine zentrale Rolle bei der Entwicklung der Quantentheorie spielt.

6.4 Kanonische Transformationen

Wir hatten in der Lagrangeschen Mechanik gesehen, dass die Wahl der generalisierten Koordinaten q_α nicht eindeutig ist, sondern dass eine beliebige Punkttransformation

$$q_\alpha \mapsto Q_\mu = Q_\mu(q_\alpha, t) \quad (6.104)$$

wieder zu den gleichen Lagrangegleichungen führt. Das heisst, dass die Lagrangefunktion $L' = L[q_\alpha(Q_\mu, t), \dot{q}_\alpha(Q_\mu, \dot{Q}_\mu, t), t] = L'(Q_\mu, \dot{Q}_\mu, t)$, die aus der

ursprünglichen Lagrangefunktion durch Ersetzen der Variablen hervorgeht, die Lagrangegleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L'}{\partial \dot{Q}_\mu} - \frac{\partial L'}{\partial Q_\mu} = 0 \quad (6.105)$$

erfüllt. Zum anderen sind die Lagrangegleichungen invariant unter Eichtransformationen, bei denen zur Lagrangefunktion die totale Zeitableitung einer beliebigen Funktion $R(q_\alpha, t)$, die von den generalisierten Koordinaten und der Zeit abhängen kann, dazuaddiert wird,

$$L' = L + \frac{d}{dt} R(q_\alpha, t). \quad (6.106)$$

Diese Invarianz unter Koordinatentransformationen ist aus dem Hamilton-Prinzip einsichtig, wenn man bedenkt, dass dort unabhängig von der Wahl der Koordinaten immer dieselbe Bahn ausgewählt wird. Eichtransformationen ändern nur die Wirkung um einen konstanten Betrag, so dass wiederum keine Auswirkungen auf das Wirkungsprinzip $\delta S = 0$ zu erwarten sind. Da wir aus dem verallgemeinerten Hamilton-Prinzip die kanonischen Gleichungen durch unabhängige Variation der generalisierten Koordinaten q_α und Impulse p_α gewonnen haben, trifft die Forminvarianz unter Punkttransformationen auch auf die kanonischen Gleichungen zu, wenn man die Impulse gemäß ihrer Definition (4.111) mittransformiert.

Wir zeigen nun, dass auch unter einer Eichtransformation (6.106) die kanonischen Gleichungen forminvariant sind. Die transformierten Impulse sind

$$\begin{aligned} p'_\alpha &= \frac{\partial L'}{\partial \dot{q}_\alpha} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} + \frac{\partial}{\partial \dot{q}_\alpha} \frac{d}{dt} R(q_\alpha, t) \\ &= \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} + \frac{\partial}{\partial \dot{q}_\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial t} R(q_\alpha, t) + \sum_{\beta=1}^f \frac{\partial R(q_\alpha, t)}{\partial q_\beta} \dot{q}_\beta \right) \\ &= \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} + \frac{\partial R(q_\alpha, t)}{\partial q_\alpha} = p_\alpha + \frac{\partial R(q_\alpha, t)}{\partial q_\alpha}, \end{aligned} \quad (6.107)$$

während die generalisierten Koordinaten unverändert bleiben, $q'_\alpha = q_\alpha$. Die transformierte Hamiltonfunktion berechnet sich zu

$$\begin{aligned} H' &= \sum_{\alpha=1}^f p'_\alpha \dot{q}'_\alpha - L' = \sum_{\alpha=1}^f \left(p_\alpha + \frac{\partial R(q_\beta, t)}{\partial q_\alpha} \right) \dot{q}_\alpha - L - \frac{d}{dt} R(q_\alpha, t) \\ &= H + \sum_{\alpha=1}^f \frac{\partial R(q_\beta, t)}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha - \frac{d}{dt} R(q_\alpha, t) = H - \frac{\partial R(q_\alpha, t)}{\partial t}. \end{aligned} \quad (6.108)$$

Mit dieser Hamiltonfunktion überprüfen wir die kanonischen Gleichungen

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H'}{\partial q'_\alpha} &= \frac{\partial H'}{\partial q_\alpha} = \sum_{\beta=1}^f \left(\frac{\partial H}{\partial q_\beta} \frac{\partial q_\beta}{\partial q_\alpha} + \frac{\partial H}{\partial p_\beta} \frac{\partial p_\beta}{\partial q_\alpha} \right) - \frac{\partial^2 R}{\partial q_\alpha \partial t} \\
&= \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} + \sum_{\beta=1}^f \dot{q}_\beta \frac{\partial p_\beta}{\partial q_\alpha} - \frac{\partial^2 R}{\partial q_\alpha \partial t} = -\dot{p}_\alpha - \sum_{\beta=1}^f \dot{q}_\beta \frac{\partial^2 R}{\partial q_\alpha \partial q_\beta} - \frac{\partial^2 R}{\partial q_\alpha \partial t} \\
&= -\dot{p}_\alpha - \frac{d}{dt} \frac{\partial R}{\partial q_\alpha} = -\dot{p}'_\alpha, \tag{6.109}
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial H'}{\partial p'_\alpha} = \sum_{\beta=1}^f \frac{\partial H}{\partial p_\beta} \frac{\partial p_\beta}{\partial p'_\alpha} = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} = \dot{q}_\alpha = \dot{q}'_\alpha. \tag{6.110}$$

Damit haben wir gezeigt, dass tatsächlich die kanonischen Gleichungen forminvariant unter Eichtransformationen sind. Gleichzeitig haben wir aber erhalten, dass die transformierten Variablen $(q_\alpha, p_\alpha + \partial R / \partial q_\alpha)$ ebenfalls wieder kanonisch konjugierte Variablen sind, also die Größe $p_\alpha + \partial R / \partial q_\alpha$ ebenfalls einen zu q_α kanonisch konjugierten Impuls darstellt. Das heisst weiterhin, dass bei Vorgabe der generalisierten Koordinaten q_α die dazugehörigen Impulse nicht eindeutig definiert sind, da sie durch Eichtransformationen verändert werden können.

Die Frage besteht nun, ob es noch andere Transformationen gibt, die die kanonischen Gleichungen forminvariant lassen. Dazu betrachten wir eine Punkttransformation

$$q'_\beta = q'_\beta(q_\alpha, p_\alpha, t), \quad p'_\beta = p'_\beta(q_\alpha, p_\alpha, t) \tag{6.111}$$

im Phasenraum. Während die Lagrangegleichungen unter beliebigen Punkttransformationen im Konfigurationsraum invariant blieben, ist das für die kanonischen Gleichungen nicht der Fall. Wir suchen also solche Punkttransformationen im Phasenraum (Phasentransformation), die die Form der Bewegungsgleichungen unverändert lassen. Solche Transformationen nennt man **kanonische Transformationen**. Das heisst, eine Phasentransformation ist genau dann eine kanonische Transformation, wenn man eine Hamiltonfunktion $H' = H'(q'_\alpha, p'_\alpha, t)$ finden kann, so dass die Bewegungsgleichungen

$$\dot{q}'_\alpha = \frac{\partial H'}{\partial p'_\alpha}, \quad \dot{p}'_\alpha = -\frac{\partial H'}{\partial q'_\alpha} \tag{6.112}$$

gelten, wenn sie für die ursprünglichen kanonisch konjugierten Variablen (q_α, p_α) auch gegolten haben.

Beispiel: Symplektische Transformation

Ein sehr anschauliches Beispiel einer kanonischen Transformation ist die sogenannte symplektische Transformation, bei der, abgesehen von einem Minuszeichen, einfach Orte und Impulse miteinander vertauscht werden,

$$q'_\beta = q'_\beta(q_\alpha, p_\alpha, t) = p_\beta, \quad p'_\beta = p'_\beta(q_\alpha, p_\alpha, t) = -q_\beta. \quad (6.113)$$

Das ist gleichbedeutend mit einer Multiplikation des $2f$ -dimensionalen Vektors $\mathbf{x} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})^T$ mit der symplektischen Matrix Σ , $\mathbf{x}' = \Sigma \cdot \mathbf{x} = (\mathbf{p}, -\mathbf{q})$. Aus der Hamiltonfunktion $H'(q'_\alpha, p'_\alpha, t) = H[q_\alpha(q'_\beta, p'_\beta), p_\alpha(q'_\beta, p'_\beta), t] = H(-p'_\alpha, q'_\alpha, t)$ folgt dann

$$\frac{\partial H'}{\partial p'_\beta} = \frac{\partial H(-p'_\alpha, q'_\alpha, t)}{\partial p'_\beta} = -\frac{\partial H(q_\alpha, p_\alpha, t)}{\partial q_\beta} = \dot{p}_\beta = \dot{q}'_\beta, \quad (6.114)$$

$$\frac{\partial H'}{\partial q'_\beta} = \frac{\partial H(-p'_\alpha, q'_\alpha, t)}{\partial q'_\beta} = \frac{\partial H(q_\alpha, p_\alpha, t)}{\partial p_\beta} = \dot{q}_\beta = -\dot{p}'_\beta. \quad (6.115)$$

Es handelt sich bei der symplektischen Transformation tatsächlich um eine kanonische Transformation, was nach unseren Überlegungen zur symplektischen Struktur des Phasenraums auch nicht so ungewöhnlich ist. Allerdings zeigt dieses Beispiel deutlich, dass in der Hamiltonschen Formulierung der Mechanik die strenge Zuordnung ($q_\alpha =$ 'Ort') und ($p_\alpha =$ 'Impuls') vollständig irrelevant ist, sondern dass nur sinnvoll von einem Satz von kanonisch konjugierten Variablen gesprochen werden kann. Die Variablen (q_α, p_α) sind als völlig gleichberechtigt anzusehen.

Beispiel: zyklische Koordinaten

In der Lagrangeschen Mechanik hatten wir gefunden, dass sich die Bewegungsgleichungen vereinfachen lassen, wenn man in der Lage ist, zyklische Koordinaten einzuführen, also Koordinaten, von denen die Lagrangefunktion nicht explizit abhängt. Über die Legendretransformation hängt dann auch die Hamiltonfunktion nicht von diesen Koordinaten ab. Wenn es gelänge, alle Koordinaten zyklisch zu wählen, dann gilt offensichtlich

$$\dot{p}_\alpha = \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, f, \quad (6.116)$$

und damit

$$p_\alpha = a_\alpha = \text{const.} \quad (6.117)$$

Ist die Hamiltonfunktion auch noch zeitunabhängig, dann folgt mit $H = H(p_\alpha)$ aus der anderen kanonischen Gleichung

$$\dot{q}_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial p_\alpha} = \dot{q}_\alpha(p_\beta) = \dot{q}_\alpha(a_\beta). \quad (6.118)$$

Wenn die \dot{q}_α aber nur von den Konstanten a_α abhängen, müssen sie selbst konstant sein,

$$\dot{q}_\alpha = b_\alpha = \text{const.} \quad (6.119)$$

und die Bewegungsgleichungen lassen sich leicht integrieren zu

$$q_\alpha = b_\alpha t + c_\alpha, \quad (6.120)$$

wobei die a_α und c_α aus den Anfangsbedingungen bestimmt werden. Damit wäre das gesamte Problem gelöst. Die Frage besteht nun, ob es tatsächlich möglich ist, einen Satz generalisierter Koordinaten so zu finden, dass alle Koordinaten zyklisch werden. Das wird Bestandteil der Hamilton-Jacobi-Theorie in einem späteren Kapitel sein.

6.4.1 Erzeugende der kanonischen Transformationen

Die kanonischen Gleichungen lassen sich nach unseren früheren Ausführungen aus dem Hamiltonschen Prinzip herleiten. Damit müssen sowohl

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\sum_{\alpha=1}^f p_\alpha \dot{q}_\alpha - H \right) = 0 \quad (6.121)$$

als auch

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\sum_{\alpha=1}^f p'_\alpha \dot{q}'_\alpha - H' \right) = 0 \quad (6.122)$$

gelten. Beide Variationsprobleme müssen dabei auf die gleichen Lösungsmannigfaltigkeiten führen, das heißt, sie müssen äquivalent zueinander sein.

Nach unseren Aussagen zu Eichtransformationen beim Wirkungsprinzip dürfen sich die Klammerausdrücke nur um eine totale Zeitableitung einer beliebigen Funktion $R_1(q_\alpha, q'_\alpha, t)$ der 'alten' und 'neuen' Koordinaten q_α und q'_α sowie der Zeit t unterscheiden,

$$\underbrace{\sum_{\alpha=1}^f p_\alpha \dot{q}_\alpha - H}_L = \underbrace{\sum_{\alpha=1}^f p'_\alpha \dot{q}'_\alpha - H'}_{L'} + \frac{d}{dt} R_1(q_\alpha, q'_\alpha, t). \quad (6.123)$$

Da beim Variieren der Pfade die Anfangspunkte und Endpunkte nicht mitvariiert werden, also $\delta q_\alpha(t_1) = \delta q'_\alpha(t_1) = \delta q_\alpha(t_2) = \delta q'_\alpha(t_2) = 0$ sind, gilt

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{d}{dt} R_1(q_\alpha, q'_\alpha, t) = \delta R_1[q_\alpha(t_2), q'_\alpha(t_2), t] - \delta R_1[q_\alpha(t_1), q'_\alpha(t_1), t] = 0. \quad (6.124)$$

Wertet man die totale Zeitableitung der Funktion $R_1(q_\alpha, q'_\alpha, t)$ aus und vergleicht mit Gl. (6.123), so erhält man

$$\frac{d}{dt} R_1 = \sum_{\alpha=1}^f \left(\frac{\partial R_1}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha + \frac{\partial R_1}{\partial q'_\alpha} \dot{q}'_\alpha \right) + \frac{\partial R_1}{\partial t} = \sum_{\alpha=1}^f (p_\alpha \dot{q}_\alpha - p'_\alpha \dot{q}'_\alpha) + H' - H. \quad (6.125)$$

Aus der letzten Gleichheit lesen wir ab, dass die Beziehungen

$$p_\alpha = \frac{\partial R_1}{\partial q_\alpha}, \quad p'_\alpha = -\frac{\partial R_1}{\partial q'_\alpha}, \quad H' = H + \frac{\partial R_1}{\partial t} \quad (6.126)$$

gelten müssen. Die $2f$ Gleichungen für die Impulse bestimmen nun vollständig die Transformation für den Übergang von den 'alten' Variablen (q_α, p_α) zu den 'neuen' Variablen (q'_α, p'_α) , und die (beliebige) Funktion $R_1(q_\alpha, q'_\alpha, t)$ heisst die **Erzeugende** dieser Transformation.

Das Vorgehen bei der Transformation ist also wie folgt: Wir geben eine Erzeugende $R_1(q_\alpha, q'_\alpha, t)$ vor und berechnen aus der ersten Beziehung in (6.126)

$$p_\alpha = \frac{\partial R_1}{\partial q_\alpha} = p_\alpha(q_\beta, q'_\beta, t) \quad \rightsquigarrow \quad q'_\alpha = q'_\alpha(q_\beta, p_\beta, t), \quad (6.127)$$

das heisst, die neuen Koordinaten sind durch eine Umkehrtransformation aus der ersten Beziehung in (6.126) gegeben. Mit dieser Relation geht man nun in die zweite Beziehung in (6.126) und findet

$$p'_\alpha = -\frac{\partial R_1}{\partial q'_\alpha} = p'_\alpha(q_\beta, q'_\beta, t) \quad \rightsquigarrow \quad p'_\alpha = p'_\alpha(q_\beta, p_\beta, t). \quad (6.128)$$

Aus der letzten Beziehung in (6.126) folgt dann die transformierte Hamiltonfunktion

$$H'(q'_\alpha, p'_\alpha, t) = H[q_\alpha(q'_\beta, p'_\beta, t), p_\alpha(q'_\beta, p'_\beta, t), t] + \frac{\partial}{\partial t} R_1[q_\alpha(q'_\beta, p'_\beta, t), q'_\alpha, t]. \quad (6.129)$$

Man kann nun wieder zeigen, dass die durch R_1 erzeugte Transformation tatsächlich kanonisch ist.

Beispiel: Erzeugende der symplektischen Transformation

Als Beispiel betrachten wir die Erzeugende

$$R_1(q_\alpha, q'_\alpha, t) = \sum_{\alpha=1}^f q_\alpha q'_\alpha. \quad (6.130)$$

Aus Gl. (6.126) folgt dann

$$p_\alpha = \frac{\partial R_1}{\partial q_\alpha} = q'_\alpha, \quad p'_\alpha = -\frac{\partial R_1}{\partial q'_\alpha} = -q_\alpha, \quad H' = H. \quad (6.131)$$

Das so gewählte R_1 erzeugt also gerade die symplektische Transformation

$$(q_\alpha, p_\alpha) \mapsto (-p'_\alpha, q'_\alpha), \quad (6.132)$$

bei der Orte und Impulse bis auf ein Minuszeichen vertauscht werden.

6.4.2 Äquivalente Formen der erzeugenden Funktion

Mitunter ist es hilfreich oder zweckmässig, nicht eine erzeugende Funktion der Variablen q_α und q'_α zu betrachten, sondern andere Kombinationen aus 'alten' und 'neuen' Variablen. Schließlich sind die Variablen q_α und q'_α durch nichts

gegenüber den anderen Variablen ausgezeichnet, da alle anderen Kombinationen über Legendretransformationen zugänglich sind. Man unterscheidet die folgenden Erzeugenden:

$$R_1 = R_1(q_\alpha, q'_\alpha, t), \quad (6.133a)$$

$$R_2 = R_2(q_\alpha, p'_\alpha, t), \quad (6.133b)$$

$$R_3 = R_3(p_\alpha, q'_\alpha, t), \quad (6.133c)$$

$$R_4 = R_4(p_\alpha, p'_\alpha, t). \quad (6.133d)$$

Für die Legendretransformationen vereinbart man, dass man das Produkt der Variablen subtrahiert, wenn man ein q_α durch ein p_α ersetzen will bzw. addiert, wenn man ein q'_α durch ein p'_α ersetzen will.

$$R_2 = R_2(q_\alpha, p'_\alpha, t)$$

Durch Legendretransformation bezüglich der Variablen q'_α und p'_α erhält man aus R_1

$$R_2(q_\alpha, p'_\alpha, t) = R_1(q_\alpha, q'_\alpha, t) + \sum_{\alpha=1}^f p'_\alpha q'_\alpha. \quad (6.134)$$

Dessen totale Zeitableitung liefert unter Verwendung der totalen Zeitableitung von R_1 [Gl. (6.125)]

$$\frac{dR_2}{dt} = \frac{dR_1}{dt} + \sum_{\alpha=1}^f (p'_\alpha \dot{q}'_\alpha + \dot{p}'_\alpha q'_\alpha) = \sum_{\alpha=1}^f (p_\alpha \dot{q}_\alpha + \dot{p}'_\alpha q'_\alpha) + (H' - H). \quad (6.135)$$

Ein Vergleich mit

$$\frac{dR_2}{dt} = \sum_{\alpha=1}^f \left(\frac{\partial R_2}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha + \frac{\partial R_2}{\partial p'_\alpha} \dot{p}'_\alpha \right) + \frac{\partial R_2}{\partial t} \quad (6.136)$$

liefert

$$p_\alpha = \frac{\partial R_2}{\partial q_\alpha}, \quad q'_\alpha = \frac{\partial R_2}{\partial p'_\alpha}, \quad H' = H + \frac{\partial R_2}{\partial t}. \quad (6.137)$$

$$R_3 = R_3(p_\alpha, q'_\alpha, t)$$

Durch Legendretransformation bezüglich der Variablen p_α und q_α erhält man aus R_1

$$R_3(p_\alpha, q'_\alpha, t) = R_1(q_\alpha, q'_\alpha, t) - \sum_{\alpha=1}^f p_\alpha q_\alpha. \quad (6.138)$$

Durch Bildung der totalen Zeitableitung und Koeffizientenvergleich folgt dann

$$q_\alpha = -\frac{\partial R_3}{\partial p_\alpha}, \quad p'_\alpha = -\frac{\partial R_3}{\partial q'_\alpha}, \quad H' = H + \frac{\partial R_3}{\partial t}. \quad (6.139)$$

$$R_4 = R_4(p_\alpha, p'_\alpha, t)$$

Schlussendlich erhält man durch doppelte Legendretransformation bezüglich der Variablen p_α und q_α sowie q'_α und p'_α aus R_1

$$R_4(p_\alpha, p'_\alpha, t) = R_1(q_\alpha, q'_\alpha, t) - \sum_{\alpha=1}^f p_\alpha q_\alpha + \sum_{\alpha=1}^f p'_\alpha q'_\alpha. \quad (6.140)$$

Analog erhält man aus der totalen Zeitableitung

$$q_\alpha = -\frac{\partial R_4}{\partial p_\alpha}, \quad q'_\alpha = \frac{\partial R_4}{\partial p'_\alpha}, \quad H' = H + \frac{\partial R_4}{\partial t}. \quad (6.141)$$

Wir haben die erhaltenden Transformationsformeln noch einmal in der Tabelle 6.1 zusammengefasst.

	q'_α	p'_α
q_α	$R_1(q_\alpha, q'_\alpha, t)$ $p_\alpha = \frac{\partial R_1}{\partial q_\alpha}, \quad p'_\alpha = -\frac{\partial R_1}{\partial q'_\alpha}$	$R_2(q_\alpha, p'_\alpha, t)$ $p_\alpha = \frac{\partial R_2}{\partial q_\alpha}, \quad q'_\alpha = \frac{\partial R_2}{\partial p'_\alpha}$
p_α	$R_3(q_\alpha, q'_\alpha, t)$ $q_\alpha = -\frac{\partial R_3}{\partial p_\alpha}, \quad p'_\alpha = -\frac{\partial R_3}{\partial q'_\alpha}$	$R_4(q_\alpha, p'_\alpha, t)$ $q_\alpha = -\frac{\partial R_4}{\partial p_\alpha}, \quad q'_\alpha = \frac{\partial R_4}{\partial p'_\alpha}$

Tabelle 6.1: Die erzeugenden Funktionen der kanonischen Transformationen und ihre Abhängigkeiten

Beispiele für kanonische Transformationen

Wir geben hier noch ein paar weitere Beispiele für die Anwendung der kanonischen Transformationen und ihrer Erzeugenden an:

Identische Transformation Die Erzeugenden $R_2(q_\alpha, p'_\alpha, t) = \sum_{\alpha} q_\alpha p'_\alpha$ bzw. $R_3(p_\alpha, q'_\alpha, t) = -\sum_{\alpha} p_\alpha q'_\alpha$ erzeugen jeweils die identische Transformation

$$q_\alpha = q'_\alpha, \quad p_\alpha = p'_\alpha, \quad H' = H. \quad (6.142)$$

Punkttransformation im Konfigurationsraum Wählen wir $R_2(q_\alpha, p'_\alpha, t) = \sum_\alpha f_\alpha(q_\beta, t)p'_\alpha$, so wird wegen

$$q'_\alpha = \frac{\partial R_2}{\partial p'_\alpha} = f_\alpha(q_\beta, t) \quad (6.143)$$

gerade eine Punkttransformation im Konfigurationsraum realisiert, die wir schon in der Lagrangeschen Mechanik kennengelernt haben. Offensichtlich ist diese Transformation aber auch eine kanonische Transformation, sie lässt also sowohl Lagrangegleichungen als auch kanonische Gleichungen invariant. Allerdings muss beachtet werden, dass bei dieser kanonischen Transformation wegen

$$p_\alpha = \frac{\partial R_2}{\partial q_\alpha} = \sum_\beta \frac{\partial f_\beta}{\partial q_\alpha} p'_\beta \quad (6.144)$$

auch die Impulse transformiert werden. Diese Gleichung muss dann noch nach den p'_β aufgelöst werden.

Eichtransformation Wir hatten schon früher gesehen, dass Eichtransformationen kanonische Transformationen sind, da wir explizit nachgerechnet hatten, dass die kanonischen Gleichungen unter Eichtransformationen forminvariant sind. Diese lassen sich durch

$$R_2(q_\alpha, p'_\alpha, t) = \sum_{\alpha=1}^f q_\alpha p'_\alpha - f(q_\alpha, t) \quad (6.145)$$

erzeugen, wie man leicht nachrechnet:

$$q'_\alpha = \frac{\partial R_2}{\partial p'_\alpha} = q_\alpha, \quad p_\alpha = \frac{\partial R_2}{\partial q_\alpha} = p'_\alpha - \frac{\partial f}{\partial q_\alpha}, \quad H' = H + \frac{\partial R_2}{\partial t} = -\frac{\partial f}{\partial t}. \quad (6.146)$$

Diese Gleichungen entsprechen aber genau (6.107) und (6.108).

6.4.3 Kanonische Transformationen und Poisson-Klammern

Es ist nun interessant zu wissen, ob eine gegebene Punkttransformation im Phasenraum eine kanonische Transformation ist oder nicht, ohne dass ihre

Erzeugende bekannt ist. Wir suchen also nach einem Entscheidungskriterium für die Kanonizität einer Transformation. Dies ist über die Poisson-Klammern gegeben. Wir wollen im folgenden zeigen, dass diese bei kanonischen Transformationen erhalten bleiben. Dazu betrachten wir die Poisson-Klammer zweier Größen A und B bezüglich der Variablen q_α und p_α , die wir mit $\{A, B\}_{q,p}$ bezeichnen und zeigen, dass die Beziehung

$$\{A, B\}_{q,p} = \{A, B\}_{q',p'} \quad (6.147)$$

gilt. Mit der Abhängigkeit der q_α und p_α von q'_α und p'_α berechnen wir zunächst

$$\begin{aligned} \{A, B\}_{q,p} &= \sum_{\alpha=1}^f \left(\frac{\partial A}{\partial q_\alpha} \frac{\partial B}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial A}{\partial p_\alpha} \frac{\partial B}{\partial q_\alpha} \right) \\ &= \sum_{\alpha,\beta,\gamma=1}^f \left[\left(\frac{\partial A}{\partial q'_\beta} \frac{\partial q'_\beta}{\partial q_\alpha} + \frac{\partial A}{\partial p'_\beta} \frac{\partial p'_\beta}{\partial q_\alpha} \right) \left(\frac{\partial B}{\partial q'_\gamma} \frac{\partial q'_\gamma}{\partial p_\alpha} + \frac{\partial B}{\partial p'_\gamma} \frac{\partial p'_\gamma}{\partial p_\alpha} \right) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\partial A}{\partial q'_\beta} \frac{\partial q'_\beta}{\partial p_\alpha} + \frac{\partial A}{\partial p'_\beta} \frac{\partial p'_\beta}{\partial p_\alpha} \right) \left(\frac{\partial B}{\partial q'_\gamma} \frac{\partial q'_\gamma}{\partial q_\alpha} + \frac{\partial B}{\partial p'_\gamma} \frac{\partial p'_\gamma}{\partial q_\alpha} \right) \right] \\ &= \sum_{\beta,\gamma=1}^f \left[\frac{\partial A}{\partial q'_\beta} \frac{\partial B}{\partial q'_\gamma} \{q'_\beta, q'_\gamma\}_{q,p} + \frac{\partial A}{\partial p'_\beta} \frac{\partial B}{\partial p'_\gamma} \{p'_\beta, p'_\gamma\}_{q,p} \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\partial A}{\partial q'_\beta} \frac{\partial B}{\partial p'_\gamma} - \frac{\partial A}{\partial p'_\beta} \frac{\partial B}{\partial q'_\gamma} \right) \{q'_\beta, p'_\gamma\}_{q,p} \right]. \quad (6.148) \end{aligned}$$

Damit haben wir die Berechnung der Poisson-Klammer zweier beliebiger Größen A und B auf die fundamentalen Poisson-Klammern zurückgeführt.

Erinnern wir uns an die Erzeugenden R_1 und R_2 der kanonischen Transformationen, so gelten die folgenden Beziehungen:

$$p_\alpha = \frac{\partial R_1}{\partial q_\alpha}, \quad p'_\beta = -\frac{\partial R_1}{\partial q'_\beta} \rightsquigarrow \frac{\partial^2 R_1}{\partial q_\alpha \partial q'_\beta} = -\frac{\partial p'_\beta}{\partial q_\alpha} = \frac{\partial p_\alpha}{\partial q'_\beta}, \quad (6.149a)$$

$$p_\alpha = \frac{\partial R_2}{\partial q_\alpha}, \quad q'_\beta = \frac{\partial R_2}{\partial p'_\beta} \rightsquigarrow \frac{\partial^2 R_2}{\partial q_\alpha \partial p'_\beta} = \frac{\partial q'_\beta}{\partial q_\alpha} = \frac{\partial p_\alpha}{\partial p'_\beta}. \quad (6.149b)$$

Eingesetzt in die fundamentalen Poisson-Klammern finden wir

$$\begin{aligned}\{q'_\beta, p'_\gamma\}_{q,p} &= \sum_{\alpha=1}^f \left(\frac{\partial q'_\beta}{\partial q_\alpha} \frac{\partial p'_\gamma}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial q'_\beta}{\partial p_\alpha} \frac{\partial p'_\gamma}{\partial q_\alpha} \right) \\ &= \sum_{\alpha=1}^f \left(\frac{\partial q'_\beta}{\partial q_\alpha} \frac{\partial q_\alpha}{\partial q'_\gamma} + \frac{\partial q'_\beta}{\partial p_\alpha} \frac{\partial p_\alpha}{\partial q'_\gamma} \right) = \frac{\partial q'_\beta}{\partial q'_\gamma} = \delta_{\beta\gamma}.\end{aligned}\quad (6.150)$$

Für die anderen Kombinationen erhalten wir

$$\begin{aligned}\{q'_\beta, q'_\gamma\}_{q,p} &= \sum_{\alpha=1}^f \left(\frac{\partial q'_\beta}{\partial q_\alpha} \frac{\partial q'_\gamma}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial q'_\beta}{\partial p_\alpha} \frac{\partial q'_\gamma}{\partial q_\alpha} \right) \\ &= - \sum_{\alpha=1}^f \left(\frac{\partial q'_\beta}{\partial q_\alpha} \frac{\partial q_\alpha}{\partial p'_\gamma} + \frac{\partial q'_\beta}{\partial p_\alpha} \frac{\partial p_\alpha}{\partial p'_\gamma} \right) = \frac{\partial q'_\beta}{\partial p'_\gamma} = 0\end{aligned}\quad (6.151)$$

und analog dazu $\{p'_\beta, p'_\gamma\}_{q,p} = 0$. Insgesamt finden wir, dass

$$\{q'_\beta, q'_\gamma\}_{q,p} = \{q'_\beta, q'_\gamma\}_{q',p'} = 0 = \{p'_\beta, p'_\gamma\}_{q,p} = \{p'_\beta, p'_\gamma\}_{q',p'}\quad (6.152)$$

und

$$\{q'_\beta, p'_\gamma\}_{q,p} = \{q'_\beta, p'_\gamma\}_{q',p'} = \delta_{\beta\gamma}\quad (6.153)$$

gelten. Damit ist die Invarianz der Poisson-Klammern unter kanonischen Transformationen gezeigt.

6.4.4 Kanonische Transformationen und Störungsrechnung

In vielen Fällen ist das Lösen der Bewegungsgleichungen für eine gegebene Hamiltonfunktion nicht analytisch durchführbar, das heisst, man kann keine geschlossene Lösung für ein gegebenes Problem hinschreiben. Oftmals ist es aber so, dass man ein Problem explizit lösen kann, das sich von dem vorgegebenen Problem nur wenig unterscheidet. Man erwartet dann, dass sich auch die Lösungen des exakten Problems nur wenig von denen des einfacheren Problems unterscheiden.

Wir nehmen also an, dass sich Hamiltonfunktion eines eindimensionalen Problems als

$$H(q, p) = H_0(q, p) + V(q, p)\quad (6.154)$$

schreiben lässt, wobei die Lösungen des ungestörten Problems mit Hamiltonfunktion $H_0(q, p)$ bekannt sein sollen. Das heißt, wir kennen die Lösungen der dazugehörigen kanonischen Gleichungen

$$\dot{q} = \frac{\partial H_0}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H_0}{\partial q} \quad \rightsquigarrow \quad q = q_0(t), \quad p = p_0(t). \quad (6.155)$$

Wenn die Störung $V(q, p)$ klein genug ist, können wir also den Ansatz einer kleinen Änderung der Lösungen

$$q = q_0(t) + q', \quad p = p_0(t) + p' \quad (6.156)$$

vornehmen.

Gleichung (6.156) fassen wir als kanonische Transformation auf, für die wir die Erzeugende explizit hinschreiben können. Wir wählen dafür eine Erzeugende vom Typ $R_2(q, p', t)$ in der Form

$$R_2(q, p', t) = [q - q_0(t)] [p' + p_0(t)], \quad (6.157)$$

die wegen

$$\frac{\partial R_2}{\partial q} = p' + p_0(t) = p, \quad \frac{\partial R_2}{\partial p'} = q - q_0(t) = q' \quad (6.158)$$

tatsächlich (6.156) reproduzieren. Die zu den kanonisch transformierten Variablen q', p' gehörende Hamiltonfunktion lautet dann

$$H'(q', p', t) = H(q_0(t) + q, p_0(t) + p') + \frac{\partial R_2}{\partial t}, \quad \frac{\partial R_2}{\partial t} = q' \dot{p}_0(t) - [p' + p_0(t)] \dot{q}_0(t) \quad (6.159)$$

Zur Bestimmung der Störungen q' und p' verwenden wir deren kanonische Gleichungen

$$\dot{q}' = \frac{\partial H'}{\partial p'} = \frac{\partial H}{\partial p'} - \dot{q}_0(t) = f(q', p', t), \quad (6.160a)$$

$$\dot{p}' = -\frac{\partial H'}{\partial q'} = -\frac{\partial H}{\partial q'} - \dot{p}_0(t) = g(q', p', t). \quad (6.160b)$$

Als Anfangsbedingungen setzen wir

$$q'(0) = 0, \quad p'(0) = 0, \quad (6.161)$$

was den Anfangsbedingungen $q(0) = q_0(0)$ und $p(0) = p_0(0)$ entspricht.

Die formale Lösung von (6.160) erhalten wir durch Aufintegrieren zu

$$q'(t) = \int_0^t dt' f[q'(t'), p'(t'), t'], \quad p'(t) = \int_0^t dt' g[q'(t'), p'(t'), t']. \quad (6.162)$$

Das ist natürlich nicht die vollständige Lösung, da die Funktionen $q'(t)$ und $p'(t)$ sowohl auf der linken Seite als auch unter dem Integral auftreten. Solche Integralgleichungen können iterativ gelöst werden, indem die erhaltenen Lösungen sukzessiv in die Integrale wieder eingesetzt werden mit dem Ergebnis

$$q'_{(n+1)}(t) = \int_0^t dt' f[q'_{(n)}(t'), p'_{(n)}(t'), t'], \quad (6.163a)$$

$$p'_{(n+1)}(t) = \int_0^t dt' g[q'_{(n)}(t'), p'_{(n)}(t'), t'], \quad (6.163b)$$

$$q'_{(0)}(t) = p'_{(0)}(t) = 0. \quad (6.163c)$$

6.5 Hamilton–Jacobi-Theorie

Im Rahmen der kanonischen Transformationen ist uns schon aufgefallen, dass wir die Hamiltonfunktion durch Angabe der erzeugenden Funktion einer kanonischen Transformation verändern können. Insbesondere könnte man versuchen, immer mehr zyklische Koordinaten einzuführen, um die Lösung der Bewegungsgleichungen immer weiter zu vereinfachen. Im Extremfall kann man sich vorstellen, dass man eine kanonische Transformation so findet, dass

$$H' = 0 \quad (6.164)$$

gilt, bei der alle Koordinaten und Impulse zyklisch sind. Dann folgt aus den kanonischen Gleichungen

$$q'_\alpha = a_\alpha = \text{const.}, \quad p'_\alpha = b_\alpha = \text{const.} \quad (6.165)$$

Sind also die Transformationen $(q_\alpha, p_\alpha) \mapsto (q'_\alpha, p'_\alpha)$ bekannt, so können deren Lösungen über die Konstanten (a_α, b_α) ausgedrückt werden,

$$q_\alpha = q_\alpha(q'_\alpha, p'_\alpha, t) = q_\alpha(a_\alpha, b_\alpha, t), \quad p_\alpha = p_\alpha(q'_\alpha, p'_\alpha, t) = p_\alpha(a_\alpha, b_\alpha, t). \quad (6.166)$$

Da die $q_\alpha(t)$ und $p_\alpha(t)$ als Funktionen der Zeit noch von den $2f$ Integrationskonstanten (a_α, b_α) abhängen, wäre also das Problem vollständig und eindeutig gelöst.

Den Preis, den man für diese Überlegungen zahlt ist, diejenige kanonische Transformation angeben zu müssen, die auf $H' = 0$ führt. Wir wollen zunächst die Bedingungen ableiten, die die Erzeugende dieser Transformation erfüllen muss. Dazu betrachten wir die Erzeugende

$$S \equiv R_2(q_\alpha, p'_\alpha, t) = R_2(q_\alpha, b_\alpha, t), \quad (6.167)$$

für die

$$p_\alpha = \frac{\partial S}{\partial q_\alpha}, \quad a_\alpha = \frac{\partial S}{\partial b_\alpha}, \quad H' = H + \frac{\partial S}{\partial t} \quad (6.168)$$

gilt. Da $H' = 0$ sein soll, folgt damit die Bedingung

$$H\left(q_\alpha, \frac{\partial S}{\partial q_\alpha}, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (6.169)$$

Diese Gleichung, die **Hamilton–Jacobi–Gleichung**, bestimmt die Erzeugende S der kanonischen Transformation. Gleichung (6.169) ist eine partielle Differentialgleichung für S , die wir anstelle der $2f$ gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung für die q_α und p_α zu lösen haben. In der Hamilton–Jacobi–Gleichung (6.169) treten nur die f generalisierten Koordinaten q_α und die Zeit t als unabhängige Variable auf. Deshalb muss die vollständige Lösung $f + 1$ freie Konstanten enthalten. Eine dieser Konstanten ist additiv, weil S nur in Form von Ableitungen in (6.169) vorkommt.

Die physikalische Interpretation der Erzeugenden S wird klar, wenn wir ihre zeitliche Ableitung betrachten,

$$\frac{dS}{dt} = \sum_{\alpha=1}^f \frac{\partial S}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha + \frac{\partial S}{\partial t}, \quad (6.170)$$

wobei die partiellen Ableitungen nach p'_α wegen $p'_\alpha = \text{const.}$ und damit $\dot{p}'_\alpha = 0$ nicht auftreten. Unter Verwendung von (6.168) und der Hamilton–Jacobi–Gleichung (6.169) folgt demnach

$$\frac{dS}{dt} = \sum_{\alpha=1}^f p_\alpha \dot{q}_\alpha - H = L. \quad (6.171)$$

Die zeitliche Ableitung der Erzeugenden ist also nichts anderes als die Lagrangefunktion des Systems. Aufintegriert erhalten wir

$$S = \int dt L \quad (6.172)$$

mit der Interpretation der Erzeugenden S als der Wirkungsfunktion entlang der Bahnkurve. Die Hamilton–Jacobi-Gleichung (6.169) ist also gerade diejenige Gleichung, der die Wirkung S genügen muss.

6.5.1 Verkürzte Wirkungsfunktion

Aus der Hamilton–Jacobi-Gleichung (6.169) folgt, dass für nicht explizit von der Zeit abhängende Hamiltonfunktionen

$$E + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad \rightsquigarrow \quad S = -Et + S_0 \quad (6.173)$$

gelten muss. Die **verkürzte Wirkungsfunktion** oder **charakteristische Funktion** S_0 hängt nur von den Koordinaten q_α ab und genügt der verkürzten Hamilton–Jacobi-Gleichung

$$H\left(q_\alpha, \frac{\partial S_0}{\partial q_\alpha}, t\right) = E. \quad (6.174)$$

Das totale Differential der verkürzte Wirkungsfunktion ist dann gerade

$$dS_0 = \sum_{\alpha=1}^f \frac{\partial S_0}{\partial q_\alpha} dq_\alpha = \sum_{\alpha=1}^f p_\alpha dq_\alpha. \quad (6.175)$$

Andererseits gilt

$$dS = L dt = dS_0 - E dt \quad \rightsquigarrow \quad dS_0 = (L + E) dt. \quad (6.176)$$

Benutzen wir, dass $L = T - U$ und $E = T + U$ gelten, so folgt

$$dS_0 = 2T dt \quad \rightsquigarrow \quad S_0 = \int_{t_1}^{t_2} dt 2T. \quad (6.177)$$

Für konservative, skleronome Systeme ist also die charakteristische Funktion gerade durch ein Zeitintegral über die doppelte kinetische Energie gegeben.

Beispiel: Der schräge Wurf

Als Beispiel für die Auswertung der Hamilton–Jacobi-Gleichung betrachten wir den schrägen Wurf eines Massenpunktes im Schwerfeld der Erde. Dessen Hamiltonfunktion lautet

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + mgz \quad (6.178)$$

und damit die verkürzte Hamilton–Jacobi-Gleichung

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S_0}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S_0}{\partial y} \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S_0}{\partial z} \right)^2 + mgz = E. \quad (6.179)$$

Aus dieser Gleichung haben wir S_0 zu bestimmen. Dazu führen wir einen Separationsansatz durch, indem wir $S_0(x, y, z)$ als Summe von Funktionen ansetzen, die nur von jeweils einer Koordinaten abhängen,

$$S_0(x, y, z) = S_0^{(1)}(x) + S_0^{(2)}(y) + S_0^{(3)}(z). \quad (6.180)$$

Damit wird (6.179) zu

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S_0^{(1)}}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S_0^{(2)}}{\partial y} \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S_0^{(3)}}{\partial z} \right)^2 + mgz = E. \quad (6.181)$$

Diese Gleichung kann nur erfüllt werden, wenn

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S_0^{(1)}}{\partial x} \right)^2 = \text{const.}, \quad (6.182a)$$

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S_0^{(2)}}{\partial y} \right)^2 = \text{const.}, \quad (6.182b)$$

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S_0^{(3)}}{\partial z} \right)^2 + mgz = \text{const.} \quad (6.182c)$$

gilt. Daraus folgen die Lösungen

$$\frac{\partial S_0^{(1)}}{\partial x} = b_1 \quad \rightsquigarrow \quad S_0^{(1)}(x) = b_1 x, \quad (6.183a)$$

$$\frac{\partial S_0^{(2)}}{\partial y} = b_2 \quad \rightsquigarrow \quad S_0^{(2)}(y) = b_2 y, \quad (6.183b)$$

$$\frac{\partial S_0^{(3)}}{\partial z} = \sqrt{b_3^2 - 2m^2gz} \quad \rightsquigarrow \quad S_0^{(3)}(z) = -\frac{1}{3m^2g}(b_3^2 - 2m^2gz)^{3/2}. \quad (6.183c)$$

Die Integrationskonstanten sind noch über die Bedingung

$$\frac{1}{2m}(b_1^2 + b_2^2 + b_3^2) = E \quad (6.184)$$

miteinander verknüpft. Damit ist die Wirkung wegen $S = -Et + S_0$

$$S = -\frac{1}{2m}(b_1^2 + b_2^2 + b_3^2)t + b_1x + b_2y - \frac{1}{3m^2g}(b_3^2 - 2m^2gz)^{3/2}. \quad (6.185)$$

Dies ist also diejenige Erzeugende der kanonischen Transformation, die zu $H' = 0$ führt. Partielle Differentiation der Wirkungsfunktion S nach den Integrationskonstanten (die wir mit den 'neuen' Impulsen identifizieren) liefert die transformierten (zyklischen) Koordinaten [siehe Gl. (6.168)]

$$\frac{\partial S}{\partial b_1} = -\frac{b_1}{m}t + x = a_1 \quad \rightsquigarrow \quad x = \frac{b_1}{m}t + a_1, \quad (6.186a)$$

$$\frac{\partial S}{\partial b_2} = -\frac{b_2}{m}t + y = a_2 \quad \rightsquigarrow \quad y = \frac{b_2}{m}t + a_2, \quad (6.186b)$$

$$\frac{\partial S}{\partial b_3} = -\frac{b_3}{m}t - \frac{b_3}{m^2g}(b_3^2 - 2m^2gz)^{1/2} = a_3. \quad (6.186c)$$

Die letzte Gleichung formt man um in

$$z = -\frac{g}{2}t^2 - \frac{mga_3}{b_3}t + \frac{b_3^2}{2m^2g} - \frac{m^2ga_3^2}{2b_3^2} \equiv -\frac{g}{2}t^2 + at + b. \quad (6.187)$$

Damit beschreiben die Lösungen der Bewegungsgleichungen tatsächlich geradlinig gleichförmige Bewegungen in horizontaler Richtung, und eine gleichförmig beschleunigte Bewegung in vertikaler Richtung.

Wirkungs- und Winkelvariable

Wir zeigen nun, dass man durch die Einführung von speziell gewählten Koordinaten die Lösung periodischer Probleme stark vereinfachen kann. Periodisch heisst hier, dass entweder die Bahn im Phasenraum eine geschlossene

Kurve darstellt, also $q(t + T) = q(t)$ und $p(t + T) = p(t)$ ist, oder dass sich die Koordinate in einer Periode T um einen Konstanten Wert q_0 (meist 2π) ändert, $q(t + T) = q(t) + q_0$. Ein Beispiel für den ersten Fall ist ein Feder-schwinger mit der generalisierten Koordinate, die der Auslenkung entspricht, ein Beispiel für den zweiten Fall ist ein Pendel, das über eine Winkelkoordi-nate beschrieben wird.

Wir suchen nun eine kanonische Transformation, die zu konstanten 'neuen' Impulsen p'_α und zyklischen 'neuen' Koordinaten q'_α führt. Wir haben gesehen, dass dies durch die charakteristische Funktion $S_0(\mathbf{q})$ gerade erreicht wird. Die charakteristische Funktion $S_0(\mathbf{q})$ ist aber eine Lösung der verkürzten Hamilton–Jacobi-Gleichung mit Integrationskonstanten b_α , die gerade die 'neuen' Impulse darstellen, $p'_\alpha = b_\alpha$. Die Idee ist nun, nicht die Integrationskonstanten b_α direkt mit den Impulsen zu identifizieren, sondern gewisse Funktionen von b_α . Die **Wirkungsvariablen**

$$J_\alpha = \oint p_\alpha dq_\alpha \quad (6.188)$$

sind genau solche Kombinationen, wobei die Integration über eine volle Periode der periodischen Bewegung geht. Äquivalent dazu ist die Aussage, dass die Integration entlang einer Trajektorie im Phasenraum mit konstanter Gesamtenergie $E(q_\alpha, p_\alpha)$ verläuft. Da die Wirkungsvariablen nicht mehr die eigentliche Bewegung enthalten, sind sie Erhaltungsgrößen, und ihre kanonisch konjugierten Koordinaten sind zyklisch.

Nehmen wir an, dass die charakteristische Funktion vollständig separierbar ist in dem Sinne, dass

$$S_0(\mathbf{q}) = \sum_{\alpha=1}^f S_{0,\alpha}(q_\alpha, \mathbf{b}), \quad (6.189)$$

dann werden die Wirkungsvariablen gerade

$$J_\alpha = \oint \frac{dS_{0,\alpha}(q_\beta, \mathbf{b})}{dq_\alpha} dq_\alpha = J_\alpha(\mathbf{b}). \quad (6.190)$$

Die Wirkungsvariable J_α beschreibt also, um welchen Betrag die Erzeugende S_0 bei einem vollen Umlauf der Koordinate q_α zunimmt. Die Koordinate q_α selbst ist dabei nur eine Integrationsvariable, so dass die Wirkungsvariable nur von den Integrationskonstanten \mathbf{b} abhängt, $J_\alpha = J_\alpha(\mathbf{b})$. Die Inversion

dieser Relation liefert eine Beziehung $\mathbf{b} = \mathbf{b}(J_\alpha)$, und damit wird die charakteristische Funktion effektiv abhängig von den Wirkungsvariablen,

$$S_0 = S_0(\mathbf{q}, \mathbf{J}). \quad (6.191)$$

Aufgrund der Struktur der verkürzten Hamilton–Jacobi-Gleichung (6.174) ist die transformierte Hamiltonfunktion eine Funktion der Wirkungsvariablen, $H' = H'(J_\alpha)$. Die zu den Wirkungsvariablen konjugierte Größen sind die **Winkelvariablen**, die über

$$\omega_\alpha = \frac{\partial S_0}{\partial J_\alpha} \quad (6.192)$$

eingeführt werden. Ihre Bewegungsgleichungen folgen aus der transformierten Hamiltonfunktion zu

$$\dot{\omega}_\alpha = \frac{\partial H'(\mathbf{J})}{\partial J_\alpha}. \quad (6.193)$$

Da nach Konstruktion die ω_α zyklische Variablen sind, muss weiterhin gelten

$$\dot{\omega}_\alpha = \nu(\mathbf{J}) = \text{const.} \quad (6.194)$$

Sie können also direkt aufintegriert werden zu

$$\omega_\alpha = \nu_\alpha t + c_\alpha. \quad (6.195)$$

Wir wollen nun die physikalische Bedeutung dieser Winkelvariablen untersuchen. Dazu betrachten wir die Änderung einer generalisierten Koordinate q_α bei einem vollen Umlauf der periodischen Bewegung, und ermitteln die Änderung der Winkelvariablen ω_β zu

$$\Delta_\alpha \omega_\beta = \oint_\alpha d\omega_\beta = \oint \frac{\partial \omega_\beta}{\partial q_\alpha} dq_\alpha = \oint \frac{\partial^2 S_0}{\partial q_\alpha \partial J_\beta} dq_\alpha = \frac{\partial}{\partial J_\beta} \oint \frac{\partial S_0}{\partial q_\alpha} dq_\alpha = \frac{\partial}{\partial J_\beta} J_\alpha, \quad (6.196)$$

woraus folgt, dass

$$\Delta_\alpha \omega_\beta = \delta_{\alpha\beta} \quad (6.197)$$

ist. Bezeichnen wir die Periodendauer, mit der sich die Koordinate q_α bewegt, mit τ_α , dann folgt weiter

$$\Delta_\alpha \omega_\alpha = \nu_\alpha \tau_\alpha = 1. \quad (6.198)$$

Die Änderung der Winkelvariablen bei einem vollen Umlauf ist also gerade Eins. Das bedeutet, dass

$$\nu_\alpha = \frac{1}{\tau_\alpha} \quad (6.199)$$

die Frequenz der zu q_α gehörenden periodischen Bewegung ist. Das heisst also, dass zur Bestimmung der Frequenz einer periodischen Bewegung überhaupt nicht die Bewegungsgleichungen selbst gelöst werden müssen, sondern dass es ausreicht, die Frequenzen direkt auszurechnen.

Beispiel: harmonischer Oszillator

Das Standardbeispiel ist hier wieder der harmonische Oszillator mit der Hamiltonfunktion

$$H = H' = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega_0^2 q^2 = E. \quad (6.200)$$

Aufgelöst nach dem Impuls erhalten wir

$$p = \pm m\omega_0 \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2} - q^2} = \frac{dS_0}{dq}. \quad (6.201)$$

Um die Integration über die periodische Bewegung durchführen zu können, benötigen wir die Umkehrpunkte der Bewegung, für die

$$q_\pm = \pm \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2}} = \pm A \quad (6.202)$$

gilt. Die Wirkungsvariable J wird damit zu

$$J = \oint p dq = 2 \int_{q_-}^{q_+} m\omega_0 \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2} - q^2} dq = 2m\omega_0 \int_{q_-}^{q_+} \sqrt{A^2 - q^2} dq. \quad (6.203)$$

Das Integral berechnet man durch Substitutionen zu

$$\int_{q_-}^{q_+} \sqrt{A^2 - q^2} dq = A^2 \int_{q_-/A}^{q_+/A} \sqrt{1 - Q^2} dQ = A^2 \int_{\arcsin(q_-/A)}^{\arcsin(q_+/A)} \cos^2 \phi d\phi \quad (6.204)$$

und somit insgesamt

$$J = 2m\omega_0^2 A^2 \left[\frac{1}{2} \arcsin \frac{q}{A} + q\sqrt{A^2 - q^2} \right] \Big|_{q_-}^{q_+} = \frac{2\pi}{\omega_0} E. \quad (6.205)$$

Die transformierte Hamiltonfunktion H' nimmt damit die Gestalt

$$H' = E = \frac{\omega_0}{2\pi} J \quad (6.206)$$

an, woraus sofort die Frequenz der Oszillation zu

$$\nu = \frac{\partial H'}{\partial J} = \frac{\omega_0}{2\pi} \quad (6.207)$$

folgt, was durchaus zu erwarten war.

Beispiel: Atommodell von Bohr und Sommerfeld

Ein nichttriviales Beispiel, das maßgeblich zum Erfolg der Quantenmechanik beigetragen hat, ist das Atommodell des Wasserstoffatoms von Bohr und Sommerfeld. Dazu gehen wir von der Bewegung eines Massenpunktes (in diesem Fall des Elektrons) in einem Zentralkraftfeld aus, das durch das Coulombpotential des Kerns gegeben ist. Durch die Separation in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten separiert das Problem, so dass wir uns das Keplerproblem eines Teilchens in einem Zentralkraftfeld anschauen können. Die Hamiltonfunktion lautet in Kugelkoordinaten

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} p_\varphi^2 \right) - \frac{k}{r} \quad (6.208)$$

mit $k = e^2/(4\pi\epsilon_0)$ und m der reduzierten Masse des Elektrons und Protons. Da φ eine zyklische Variable ist, muss p_φ eine Konstante sein, die wir schon als z -Komponente des Drehimpulses identifiziert hatten,

$$p_\varphi = mr^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi} = L_z = \text{const.} \quad (6.209)$$

Die verkürzte Hamilton–Jacobi-Gleichung lautet nun

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S_0}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S_0}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial S_0}{\partial \varphi} \right)^2 \right] - \frac{k}{r} = E. \quad (6.210)$$

Die Differentialgleichung ist separierbar, deshalb kann die charakteristische Funktion als $S_0 = S_{0,r}(r) + S_{0,\theta}(\theta) + S_{0,\varphi}(\varphi)$ geschrieben werden. Da p_φ eine Erhaltungsgröße ist, gilt

$$\frac{\partial S_{0,\varphi}}{\partial \varphi} = p_\varphi = L_z \quad \rightsquigarrow \quad S_{0,\varphi} = L_z \varphi. \quad (6.211)$$

Die Hamilton–Jacobi–Gleichung wird somit zu

$$-r^2 \left(\frac{\partial S_{0,r}}{\partial r} \right)^2 + 2m(kr + Er^2) = \left[\left(\frac{\partial S_{0,\theta}}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{L_z^2}{\sin^2 \theta} \right], \quad (6.212)$$

wobei die linke Seite der Gleichung nur noch von r und die rechte Seite nur noch von θ abhängt. Beide Seiten müssen also gleich einer Konstanten sein, die wir zunächst mit a_θ^2 bezeichnen. Durch direktes Nachrechnen stellt man fest, dass diese Konstante gerade dem Quadrat des Drehimpulses entspricht,

$$a_\theta^2 = |\mathbf{L}|^2 = L^2. \quad (6.213)$$

Damit haben alle drei Integrationskonstanten (E, L_z, L^2) physikalische Interpretationen, und die Hamilton–Jacobi–Gleichung liefert für die charakteristische Funktion die Beziehungen

$$\left(\frac{\partial S_{0,\theta}}{\partial \theta} \right)^2 = L^2 - \frac{L_z^2}{\sin^2 \theta}, \quad \left(\frac{\partial S_0}{\partial r} \right)^2 = 2m \left(E + \frac{k}{r} \right) - \frac{L^2}{r^2}. \quad (6.214)$$

Als nächstes berechnen wir die Wirkungsvariablen, die zu den periodischen Bewegungen gehören. Es ist sofort klar, dass für J_φ gilt

$$J_\varphi = \oint p_\varphi d\varphi = \oint \frac{\partial S_{0,\varphi}}{\partial \varphi} d\varphi = L_z \oint d\varphi = 2\pi L_z. \quad (6.215)$$

Für J_θ ergibt sich

$$J_\theta = \oint p_\theta d\theta = \oint \frac{\partial S_{0,\theta}}{\partial \theta} d\theta = \oint \sqrt{L^2 - \frac{L_z^2}{\sin^2 \theta}} d\theta = 2\pi(L - L_z), \quad (6.216)$$

wobei wir auf die detaillierte Berechnung des Integrals verzichten und nur das Ergebnis angeben. Analog findet man für J_r

$$J_r = \oint p_r dr = \oint \frac{\partial S_0}{\partial r} dr = \oint \sqrt{2m \left(E + \frac{k}{r} \right) - \frac{L^2}{r^2}} dr. \quad (6.217)$$

Das Integral lässt sich für negative Werte der Gesamtenergie E , also für gebundene Bewegungen explizit lösen mit dem Ergebnis

$$J_r = -2\pi L + \pi k \sqrt{\frac{2m}{-E}} = -(J_\theta + J_\varphi) + \pi k \sqrt{\frac{2m}{-E}}. \quad (6.218)$$

Damit ergibt sich für die transformierte Hamiltonfunktion

$$H'(J_r, J_\theta, J_\varphi) = E = -\frac{2\pi^2 m k^2}{(J_r + J_\theta + J_\varphi)^2}. \quad (6.219)$$

Die Frequenzen der periodischen Bewegung sind damit alle gleich (entartet)

$$\nu_i = \frac{\partial H'}{\partial J_i} = \frac{4\pi^2 m k^2}{(J_r + J_\theta + J_\varphi)^3} \quad (6.220)$$

und die Summe der drei Wirkungsvariablen kann über eine weitere kanonische Transformation zu einer Gesamtwirkung J zusammengefasst werden.

Bisher bezogen sich unsere Betrachtungen auf ein klassisches System, für das die Wirkungsvariable J beliebige Werte annehmen kann. Die **Quantenhypothese** von Bohr und Sommerfeld postuliert nun, dass J nur diskrete Werte, nämlich ganzzahlige Vielfache des Planckschen Wirkungsquantums $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ Js, annehmen kann,

$$J = nh, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (6.221)$$

Damit folgt, dass auch die Energien, die das Elektron beim Umlauf um das Proton annehmen, nur diskrete Werte annimmt. Diese sind

$$E = E_n = -\frac{2\pi^2 m k^2}{(nJ)^2} = -\frac{2\pi^2 m e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{E_R}{n^2}. \quad (6.222)$$

Den Faktor $E_R = 13.61$ eV bezeichnet man als Rydbergenergie, und n wird die Hauptquantenzahl des Wasserstoffatoms. Diese Energieformel ist exakt dasselbe Resultat, was man aus einer quantenmechanischen Rechnung erhält.

6.5.2 Teilchen- und Wellenausbreitung

Wir betrachten nun einen Massenpunkt in kartesischen Koordinaten $\mathbf{q} = (x, y, z)$, der sich in einem konservativen Kraftfeld bewegt. Damit gilt für die Wirkungsfunktion

$$S(\mathbf{q}, \mathbf{p}', t) = S_0(\mathbf{q}, \mathbf{p}') - Et. \quad (6.223)$$

Da die Wirkungsfunktion eine Erzeugende vom Typ $R_2(q_\alpha, p'_\alpha, t)$ ist, führt sie zu $H' = 0$ mit $\mathbf{p}' = \mathbf{b} = \text{const.}$ und $\mathbf{q}' = \text{const.}$ Die charakteristische Funktion $S_0(\mathbf{q}, \mathbf{p}')$ ist zeitunabhängig und wegen $\mathbf{p}' = \text{const.}$ folgt, dass die Flächen

$$S_0(\mathbf{q}, \mathbf{b}) = \text{const.} \quad (6.224)$$

feste Flächen im Konfigurationsraum der Koordinaten \mathbf{q} darstellen. Zugleich bewegen sich die Flächen $S = \text{const.}$ im Konfigurationsraum im Laufe der Zeit über die Flächen $S_0 = \text{const.}$ hinweg. Man spricht hierbei von sogenannten **Wirkungswellen**, die sich im Konfigurationsraum ausbreiten (siehe Abb. 6.7).

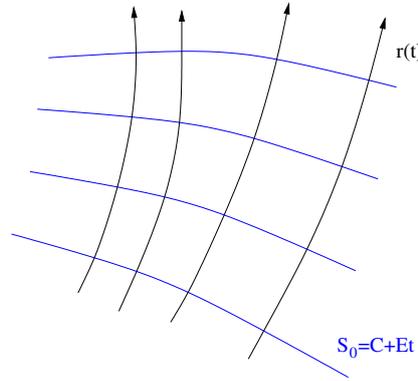


Abbildung 6.7: Wirkungswellenfronten im Konfigurationsraum.

Betrachten wir nun die Bewegung der Wellenfront an zwei kurz aufeinanderfolgenden Zeitpunkten. Wenn die Fläche $S = C$ zum Zeitpunkt t mit der Fläche

$$S_0(\mathbf{q}) = C + Et \quad (6.225)$$

zusammenfällt, dann fällt sie zum Zeitpunkt $t + dt$ mit der Fläche

$$S_0(\mathbf{q}) + dS_0(\mathbf{q}) = C + E(t + dt) \quad (6.226)$$

zusammen. Das heisst, die Wirkungsfunktion ändert sich um

$$dS_0(\mathbf{q}) = E dt = \nabla S_0(\mathbf{q}) \cdot d\mathbf{q} = \nabla S_0(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{u} dt. \quad (6.227)$$

Der Betrag der Geschwindigkeit \mathbf{u} , mit der sich eine Wirkungswelle im Konfigurationsraum ausbreitet, ist also aufgrund der Tatsache, dass $\nabla S_0 \parallel \mathbf{u}$ gilt,

$$|\mathbf{u}| = \frac{|E|}{|\nabla S_0(\mathbf{q})|}. \quad (6.228)$$

Die charakteristische Funktion $S_0(\mathbf{q})$ ist aber wie die Wirkungsfunktion S eine Erzeugende einer kanonischen Transformation vom Typ $R_2(q_\alpha, p'_\alpha, t)$, und somit gilt für den kanonischen Impuls

$$\mathbf{p} = \nabla S_0(\mathbf{q}). \quad (6.229)$$

Der Teilchenimpuls und somit die Bahnkurve des Massenpunktes stehen also ebenfalls senkrecht auf der Wellenfront $S = \text{const.}$ bzw. $S_0 = \text{const.}$, **Wirkungswellen und kanonischer Impuls sind also (anti-)parallel** gerichtet. Die Bahnkurven des Massenpunktes sind also orthogonale Trajektorien zu der sich im Raum ausbreitenden Flächen konstanter Wirkung. Für einen freien Massenpunkt gilt die Beziehung

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} \quad (6.230)$$

und somit für die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Wirkungswellen

$$|\mathbf{u}| = \frac{|E|}{m|\mathbf{v}|} = \frac{|E|}{|\mathbf{p}|}. \quad (6.231)$$

Der Betrag der Geschwindigkeit der Wirkungswellen ist also umgekehrt proportional zur Teilchengeschwindigkeit. Offensichtlich ist es also egal, ob wir die Bewegung eines Massenpunktes hinsichtlich seiner Trajektorie (Teilchenbild) oder als Ausbreitung von Wirkungswellen im Raum (Wellenbild) beschreiben. Dieser **Welle-Teilchen-Dualismus** ist ein weiterer Grundbaustein, der für die Entwicklung der Quantenmechanik wichtig wird.

Aus der verkürzten Hamilton-Jacobi-Gleichung für die Teilchenbewegung folgt nun

$$E = H(\mathbf{q}, \nabla S_0) = \frac{(\nabla S_0)^2}{2m} + U(\mathbf{q}) \quad \rightsquigarrow \quad |\nabla S_0| = \sqrt{2m(E - U)} \quad (6.232)$$

und somit

$$|\mathbf{u}| = \frac{|E|}{|\mathbf{p}|} = \frac{|E|}{\sqrt{2m(E - U)}}. \quad (6.233)$$

Ein Vergleich der beiden Formeln liefert

$$(\nabla S_0)^2 = \frac{E^2}{u^2} \quad (6.234)$$

und, wegen

$$\nabla S = \nabla S_0, \quad E = -\frac{\partial S}{\partial t}, \quad (6.235)$$

die **Wellengleichung der klassischen Mechanik**

$$(\nabla S)^2 = \frac{1}{u^2} \left(\frac{\partial S}{\partial t} \right)^2. \quad (6.236)$$

Wir sind also in der Lage, aus der verkürzten Hamilton–Jacobi–Gleichung für die Teilchenbewegung eine Wellengleichung für die Wirkungsfunktion abzuleiten. Wir wollen nun sehen, in welchem Sinn Gl. (6.236) mit der Wellenausbreitung einer elektromagnetischen Welle in Verbindung gebracht werden kann.

Wie in der Vorlesung Elektrodynamik gezeigt werden wird, breiten sich elektromagnetische Wellen gemäß der (skalaren) Wellengleichung

$$\Delta \Psi = \frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \quad (6.237)$$

aus, wobei $n = n(\mathbf{r})$ den Brechungsindex des Mediums darstellt. Die Lichtgeschwindigkeit c im Vakuum wird hier zur Ausbreitungsgeschwindigkeit im Medium $u = c/n$ modifiziert. Für konstanten Brechungsindex n sind die Lösungen von (6.237) gerade ebene Wellen

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A e^{i(n\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t + \varphi)}, \quad |\mathbf{k}| = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (6.238)$$

Die Bezeichnung ebene Welle rührt daher, dass die Flächen konstanter Phase

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = n\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t = \text{const.} \quad (6.239)$$

Ebenen sind. Eine Verallgemeinerung für räumlich veränderliche Brechungsindizes $n(\mathbf{r})$ erreicht man durch den Ansatz

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A(\mathbf{r}) e^{i\Phi(\mathbf{r}, t)}, \quad \Phi(\mathbf{r}, t) = \Phi_0(\mathbf{r}) - \omega t \quad (6.240)$$

mit räumlich veränderlicher Amplitude $A(\mathbf{r})$ und Phase $\Phi(\mathbf{r}, t)$.

Setzt man diesen Ansatz in die Wellengleichung (6.237) ein und wertet die partiellen Ableitungen aus, so erhält man mit

$$\begin{aligned}\nabla\Psi &= (\nabla A)e^{i\Phi} + i(\nabla\Phi_0)Ae^{i\Phi}, \\ \Delta\Psi &= (\Delta A)e^{i\Phi} + i(\Delta\Phi_0)Ae^{i\Phi} + 2i(\nabla\Phi_0) \cdot (\nabla A)e^{i\Phi} - (\nabla\Phi_0)^2 Ae^{i\Phi}, \\ \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} &= -\omega^2 Ae^{i\Phi}\end{aligned}\tag{6.241}$$

zwei gekoppelte partielle Differentialgleichungen für die Real- und Imaginärteile

$$\Delta A + [n^2 k^2 - (\nabla\Phi_0)^2] A = 0,\tag{6.242a}$$

$$(\Delta\Phi_0)A + 2(\nabla\Phi_0) \cdot (\nabla A) = 0.\tag{6.242b}$$

Wir nehmen nun an, dass die Lichtwellenlänge λ klein ist gegenüber den Längenskalen, auf denen sich der Brechungsindex $n(\mathbf{r})$ ändert, und dass sich die Amplitude $A(\mathbf{r})$ der Welle nur schwach ändert. Dies sind gerade die Annahmen der **geometrischen Optik**. In dieser Näherung können wir den Term ΔA weglassen und erhalten die **Eikonalgleichung** der geometrischen Optik

$$(\nabla\Phi_0) \cdot (\nabla\Phi_0) = n^2 k^2.\tag{6.243}$$

Formal ist die Eikonalgleichung (6.243) äquivalent zur Wellengleichung (6.236) der klassischen Mechanik für die Bewegung eines Teilchens in einem konservativen Kraftfeld, wenn man die Ersetzungen

$$\begin{aligned}\Phi &\leftrightarrow S, \\ \omega &\leftrightarrow |E|, \\ n^2 k^2 &\leftrightarrow 2m(E - U) = p^2\end{aligned}\tag{6.244}$$

vornimmt. Die Flächen konstanter Phase $\Phi(\mathbf{r}, t) = \text{const.}$ breiten sich mit der Phasengeschwindigkeit

$$u = \frac{\omega}{nk} = \frac{c}{n}\tag{6.245}$$

aus. Wir können also sagen, dass die klassische Mechanik den Grenzfall einer Wellenmechanik im Limes der geometrischen Optik darstellt. Diese allgemeinere Mechanik ist gerade die (Schrödingersche) Quantenmechanik, die sich als Wellenmechanik auffassen lässt.

Wir können also auf zwei unterschiedliche Weisen zu einer Erweiterung der klassischen Mechanik zu einer Quantenmechanik gelangen, die auf mikroskopische Systeme anwendbar ist. Zum einen kann über den Begriff der abstrakten (Poisson-)Klammer eine Matrixmechanik eingeführt werden, wie sie zuerst von Heisenberg entwickelt wurde. Zum anderen haben wir gesehen, dass man die klassische Mechanik im Sinne der Hamilton–Jacobi-Theorie als den geometrischen Grenzfall einer Wellenmechanik ansehen kann. Dieser Weg wurde von Schrödinger beschritten. Der eigentliche Durchbruch bei der Entwicklung der Quantenmechanik war der mathematische Beweis (maßgeblich geführt von Pauli und Jordan), dass beide Formulierungen vollkommen identisch sind.

