5. Hamilton-Mechanik

Mit der Hamiltonschen Formulierung der Bewegungsgleichungen geschieht oberflächlich betrachtet nur eine mathematische Neuformulierung der Lagrange-Gleichungen 2. Art. Diese Neuformulierung ist aber wichtig für das Verständnis der Quantenmechanik.

5.1 Hamiltonsche Bewegungsgleichungen

Das Ziel unserer Überlegungen ist der Übergang von den Veränderlichen

$$\Big(\text{Ort } \vec{q},\ \text{Geschwindigkeit } \dot{\vec{q}},\ \text{Zeit } t\Big) \to \Big(\text{Ort } \vec{q},\ \text{Impuls } \vec{p},\ \text{Zeit } t\Big) \tag{5.1.1}$$

Die Vektoren deuten an, daß es sich jeweils um die Anzahl s verallgemeinerter Koordinaten handelt.
Nach Gleichung (3.12.3) ist der in Gleichung (5.1.1) eingehende kanonisch konjugierte Impuls durch

$$p_j \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \tag{5.1.2}$$

definiert. Die Art des Übergangs (5.1.1), in dem eine partielle Ableitung als neue Variable auftaucht, geschieht elegant durch die sogenannte *Legendre-Transformation*.

5.1.1 Mathematischer Einschub: Legendre-Transformation

Wir betrachten den Übergang von einer Funktion $f(x,y)$ zur Funktion $g(x,u) = g(x, \frac{\partial f}{\partial y})$ mit

$$g(x,u) \equiv uy - f(x,y), \ \text{mit } u = \frac{\partial f}{\partial y} \tag{5.1.3}$$

Die so gebildete Funktion g enthält y nicht mehr als unabhängige Variable, wie man am totalen Differential erkennt:

$$dg = ydu + udy - df = ydu + udy - (\frac{\partial f}{\partial x}dx + \frac{\partial f}{\partial y}dy)$$

Für $u = \frac{\partial f}{\partial y}$ folgt

$$dg = ydu + udy - \frac{\partial f}{\partial x}dx - udy = ydu - \frac{\partial f}{\partial x}dx$$

und es gilt

$$\frac{\partial g}{\partial x} = -\frac{\partial f}{\partial x}$$

5.1.2 Ableitung der Hamilton-Gleichungen

Wir betrachten das totale Differential der Lagrange-Funktion:

$$dL = \sum_{j=1}^{s} \frac{\partial L}{\partial q_j} dq_j + \sum_{j=1}^{s} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} d\dot{q}_j + \frac{\partial L}{\partial t} dt \tag{5.1.4}$$

Mit Gleichung (5.1.2) und den Lagrange-Gleichungen 2. Art (3.7.13) folgt

$$\frac{\partial L}{\partial q_j} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} = \dot{p}_j,$$

sodaß

$$dL = \sum_{j=1}^{s} \dot{p}_j dq_j + \sum_{j=1}^{s} p_j d\dot{q}_j + \frac{\partial L}{\partial t} dt \tag{5.1.5}$$

Es gilt die Beziehung

$$d(\sum_{j=1}^{s} p_j \dot{q}_j) = \sum_{j=1}^{s} \dot{q}_j dp_j + \sum_{j=1}^{s} p_j d\dot{q}_j, \tag{5.1.6}$$

sodaß wir mit Gleichung (5.1.5) erhalten:

$$\begin{aligned} d(\sum_{j=1}^{s} p_j \dot{q}_j - L) &= \sum_{j=1}^{s} \dot{q}_j dp_j + \sum_{j=1}^{s} p_j d\dot{q}_j - \sum_{j=1}^{s} \dot{p}_j dq_j - \sum_{j=1}^{s} p_j d\dot{q}_j - \frac{\partial L}{\partial t} dt = \\ &\sum_{j=1}^{s} \dot{q}_j dp_j - \sum_{j=1}^{s} \dot{p}_j dq_j - \frac{\partial L}{\partial t} dt \end{aligned} \tag{5.1.7}$$

Wir definieren die Hamilton-Funktion (siehe auch Gleichung (3.12.11))

$$H(\vec{p}, \vec{q}, t) \equiv \sum_{j=1}^{s} p_j \dot{q}_j - L \tag{5.1.8}$$

Diese enthält zwar über die Lagrange-Funktion L auch die Geschwindigkeiten $\dot{q}_j$, aber diese stehen über Gleichung (5.1.2) in direktem Bezug zu den Impulsen p_j, sodaß wir $\dot{q}_j = \dot{q}_j(q_j, p_j)$ durch q_j und p_j ausdrücken können. Der Vergleich mit Gleichung (5.1.3) zeigt, daß die Hamilton-Funktion durch eine Legendre-Transformation aus der Lagrange-Funktion entsteht.

Offensichtlich ist die linke Seite von Gleichung (5.1.7) das totale Differential dH, das ebenfalls auch durch

$$dH = \sum_{j=1}^{s} \frac{\partial H}{\partial q_j} dq_j + \sum_{j=1}^{s} \frac{\partial H}{\partial p_j} dp_j + \frac{\partial H}{\partial t} dt \tag{5.1.9}$$

gegeben ist. Durch Vergleich mit Gleichung (5.1.7) folgen die *Hamiltonschen Bewegungsgleichungen*, die auch als *kanonische Bewegungsgleichungen* bezeichnet werden:

$$\frac{\partial H}{\partial q_j} = -\dot{p}_j \tag{5.1.10}$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_j} = \dot{q}_j \tag{5.1.11}$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} \tag{5.1.12}$$

Damit haben wir die s Differentialgleichungen 2. Ordnung in der Lagrange-Formulierung auf $2s$ Differentialgleichungen 1. Ordnung in der Hamilton-Formulierung reduziert.
Die kanonischen Gleichungen (5.1.10) – (5.1.11) zeigen sehr deutlich die Symmetrie und Gleichwertigkeit von Ort und Impuls auf. Die kanonischen Gleichungen zeichnen weder Ort noch Impuls besonders aus.

5.1.3 Der Phasenraum

Der mit der neuen Darstellung aufgespannte $2s$-dimensionale Raum heißt *Phasenraum*. Anschaulich kann der Phasenraum nur im Fall $s = 1$ dargestellt werden (Abb. 5.1).

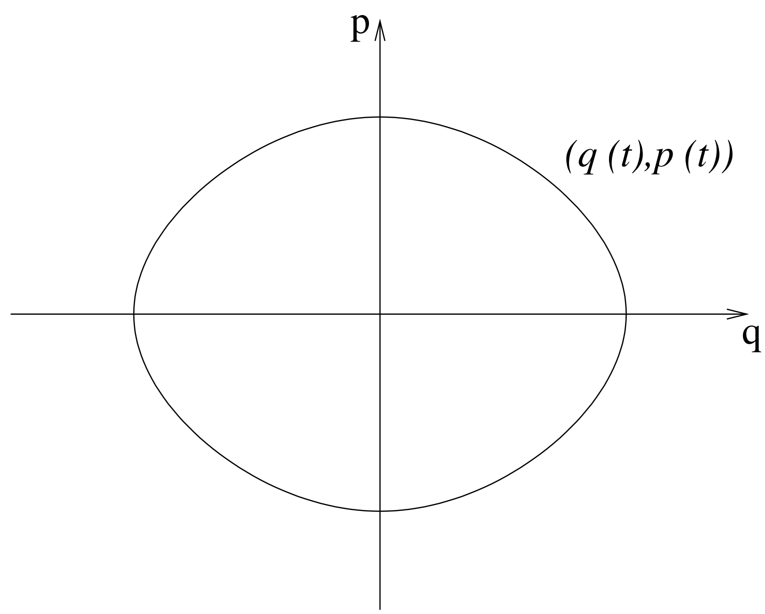

Abb. 5.1: Illustration des Phasenraum für $s = 1$.

Die in Abb. 5.1 skizzierte Kurve beschreibt die Zustände von Ort und Impuls, die das Teilchen als Funktion des Parameters t (Zeit) durchläuft. Die Zustände sind durch die Variation der Hamilton-Funktion bestimmt. Die Kurve stellt die Niveaufläche für $H = const.$ dar. Das gezeigte Beispiel entspricht einer periodischen Bewegung.

5.1.4 Bedeutung der Hamilton-Funktion

Betrachten wir zunächst den Fall, daß die Kräfte zeit- und geschwindigkeitsunabhängig sind. In Kap. 3.8.3 haben wir gezeigt, daß in diesem Fall die kinetische Energie T eine homogene Funktion 2. Grades in den verallgemeinerten Geschwindigkeiten ist. In Kap.

3.12.1 haben wir bewiesen, daß in diesem Fall die Hamiltonfunktion $H = E = T + V$ gleich der konstanten Gesamtenergie des Systems ist.
Dies verdeutlicht auch die totale Ableitung der Hamilton-Funktion nach der Zeit:

$$\frac{dH}{dt} = \sum_{j=1}^{s} \frac{\partial H}{\partial q_j} \dot{q}_j + \sum_{j=1}^{s} \frac{\partial H}{\partial p_j} \dot{p}_j + \frac{\partial H}{\partial t}$$

Mit den kanonischen Gleichungen (5.1.10) und (5.1.11) erhalten wir dafür

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} + \sum_{j=1}^{s} [\frac{\partial H}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j}] = \frac{\partial H}{\partial t} \tag{5.1.13}$$

Falls die Hamiltonfunktion nicht explizit von der Zeit abhängt (d.h. $(\partial H/\partial t) = 0$), verschwindet die totale Ableitung, und die Hamiltonfunktion und damit die Gesamtenergie sind konstant.

5.1.5 Beispiel 1: Der ein-dimensionale harmonische lineare Oszillator

Nach Kap. 2.4.4 ist die Hamilton-Funktion in diesem Fall gegeben durch

$$H = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} \tag{5.1.14}$$

Damit erhalten wir für die kanonischen Gleichungen (5.1.10) – (5.1.11)

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -kx, \quad \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m},$$

sodaß

$$\ddot{x} = \frac{\dot{p}}{m} = -\frac{k}{m} x$$

mit der Lösung

$$x(t) = A \cos \omega t + B \sin \omega t, \quad \omega = \sqrt{k/m}$$

Mit der Anfangsbedingung $x(t = 0) = A$ folgt $B = 0$, sodaß

$$x(t) = A \cos \omega t, \quad p(t) = m\dot{x} = -Am\omega \sin \omega t$$

Für die Gesamtenergie erhalten wir dann

$$E = H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} = \frac{1}{2} mA^2\omega^2 \sin^2 \omega t + \frac{1}{2} kA^2 \cos^2 \omega t = \frac{1}{2} mA^2\omega^2$$

Weil die Hamilton-Funktion konstant ist, hat Gleichung (5.1.14) die Gestalt einer Ellipsengleichung im Phasenraum, d.h. in den Koordinaten p und x, wie in Abbildung 5.2 skizziert.

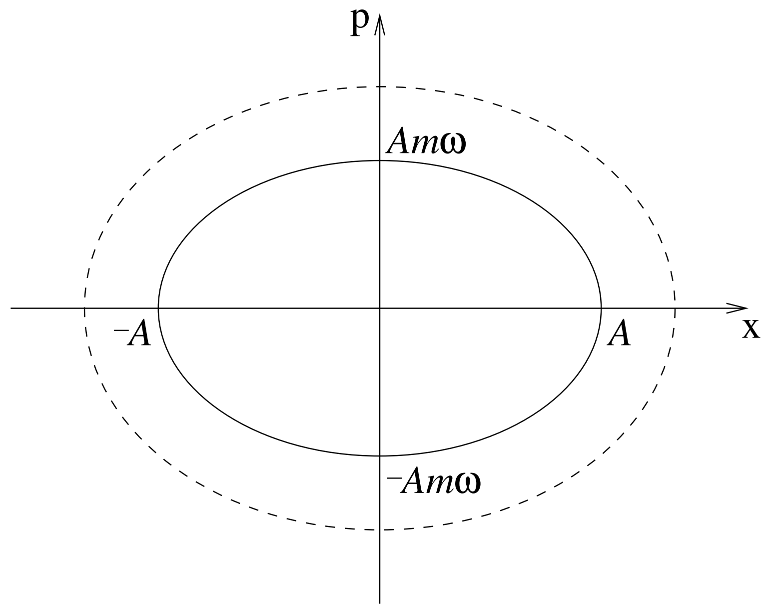

Abb. 5.2: Plasenraumdiagramm des eindimensionalen harmonischen Oszillators. Die gestrichelte Kurve repräsentiert eine höhere Gesamtenergie H'.

Die eingeschlossene Fläche im Phasenraum ist durch

$$F = \int p \, dx \tag{5.1.15}$$

und hat die Dimension einer Wirkung. Spalten wir das Integral in einen Teil oberhalb und einen Teil unterhalb der x-Achse auf, oder transformieren wir auf das entsprechende Zeit-Integral, so folgt

$$F = \int_0^{2\pi/\omega} dt \; p(t) \frac{dx}{dt} = mA^2\omega^2 \int_0^{2\pi/\omega} dt \; \sin^2 \omega t =$$
$$mA^2\omega^2\pi/\omega = \pi m\omega A^2 = \pi A^2 \sqrt{mk} \tag{5.1.16}$$

5.1.6 Beispiel 2: Geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld

Nach Gleichung (3.13.11) lautet die Lagrange-Funktion

$$L = \frac{1}{2} m\vec{v}^2 - e\Phi + \frac{e}{c}\vec{A} \cdot \vec{v} \tag{5.1.17}$$

Daraus erhalten wir den konjugierten Impuls zu

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} = m\vec{v} + \frac{e}{c}\vec{A} \tag{5.1.18}$$

oder

$$\vec{v} = \frac{1}{m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}) \tag{5.1.19}$$

Nach der Definition (5.1.8) folgt dann für die Hamilton-Funktion

$$H = \vec{p}\cdot\vec{v} - L = \frac{\vec{p}}{m}\cdot(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}) - \frac{1}{2m}(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A})^2 + e\Phi - \frac{e}{c}\vec{A}\cdot(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A})$$

$$= e\Phi + (\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A})\cdot[\frac{\vec{p}}{m} - \frac{\vec{p}}{2m} + \frac{e}{2mc}\vec{A} - \frac{e}{mc}\vec{A}] = \frac{1}{2m}(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A})^2 + \ e\Phi \qquad (5.1.20)$$

5.1.7 Beispiel 3: Das Pendel im Schwerefeld

Nach Kap. 3.2 gilt für die Lagrange-Funktion

$$L = T - V = \frac{m}{2}l^2\dot{\phi}^2 - mgl(1-\cos\phi)$$

Für den kanonisch konjugierten Impuls erhalten wir dann

$$p_\phi = \frac{\partial L}{\partial\dot{\phi}} = ml^2\dot{\phi}$$

Die Hamilton-Funktion lautet dann

$$H = T + V = E = \frac{p_\phi^2}{2ml^2} + mgl(1-\cos\phi) \qquad (5.1.21)$$

Die kanonischen Bewegungsgleichungen sind dann

$$\dot{p}_\phi = -\frac{\partial H}{\partial\phi} = -mgl\sin\phi, \quad \dot{\phi} = \frac{\partial H}{\partial p_\phi} = \frac{p_\phi}{ml^2}$$

Die zweite Gleichung liefert

$$\dot{p}_\phi = ml^2\ddot{\phi}$$

und das Gleichsetzen mit der ersten kanonischen Gleichung führt auf die bekannte (vgl. mit (3.2.24)) Bewegungsgleichung

$$\ddot{\phi} + \frac{g}{l}\sin\phi = 0$$

Aus Gleichung (5.1.21) erhalten wir für die Bahn im Phasenraum $p_\phi = p_\phi(\phi)$

$$p_\phi = \pm\sqrt{2ml^2(E - mgl + mgl\cos\phi)} \qquad (5.1.22)$$

Wie in Abb. 5.3 skizziert, ist die sich ergebende Kurvenschar vom Wert der Gesamtenergie E abhängig.

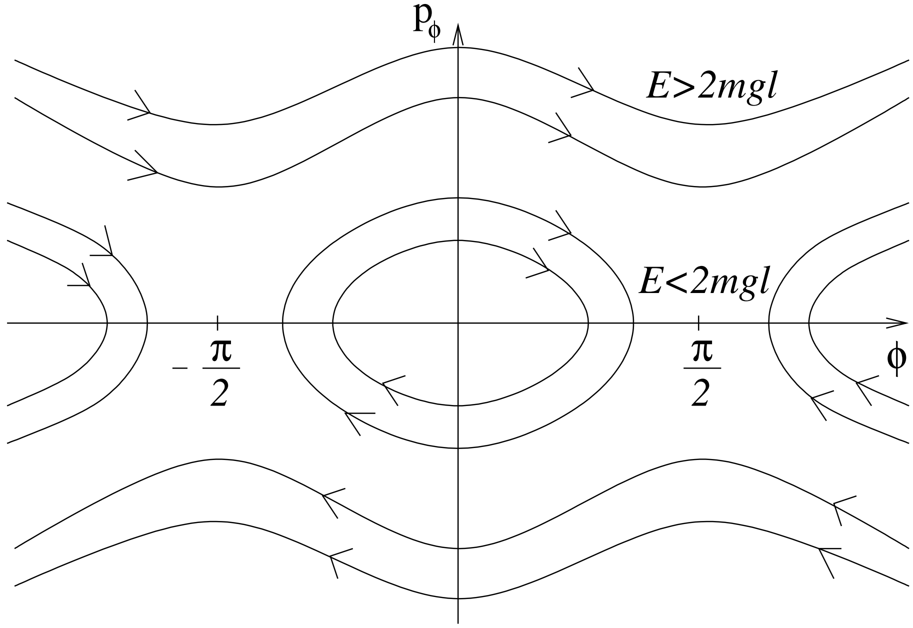

Abb. 5.3: Plasenbahnen des Pendels im Schwerefeld.

Solange $E < 2mgl$, erhalten wir geschlossene, ellipsenähnliche Kurven; das Pendel schwingt hin und her. Dies entspricht natürlich dem in Kap. 3.2.2 diskutierten Schwingungsfall.
Für $E > 2mgl$ hat das Pendel selbst in den Punkten $\phi = \pm\pi$ noch kinetische Energie und schwingt ohne Richtungsumkehr weiter. Dies entspricht dem in Kap. 3.2.5 diskutierten Rotationsfall.

5.1.8 Ableitung der kanonischen Bewegungsgleichungen aus dem Hamilton-Prinzip

Ersetzen wir im Hamilton-Prinzip (3.11.7)

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L \; dt = 0$$

die Lagrange-Funktion $L = \sum_i p_i \dot{q}_i - H(q_i, p_i, t)$ durch die Hamilton-Funktion gemäß Gleichung (5.1.8), so erhalten wir das *modifizierte Hamilton-Prinzip* zu

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} [\sum_i p_i \dot{q}_i - H(q_i, p_i, t)] dt = \delta \sum_i \int_{t_1}^{t_2} p_i \dot{q}_i - \; \delta \int_{t_1}^{t_2} H(q_i, p_i, t) dt = 0 \qquad (5.1.23)$$

Führen wir die Variation mit der δ-Notation (Kap. 3.11.1) durch, so folgt

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \sum_i [\delta p_i \dot{q}_i + p_i \delta \dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i] dt = 0 \qquad (5.1.24)$$

Im zweiten Term vertauschen wir die Ableitung nach der Zeit mit der Variation, da die Variationen bei festen Zeiten stattfinden sollen, und integrieren anschließend partiell über die Zeit

$$\int_{t_1}^{t_2} dt p_i \delta\dot{q}_i = \int_{t_1}^{t_2} dt p_i \frac{d}{dt}\delta q_i = [p_i \delta q_i]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} dt \dot{p}_i \delta q_i = -\int_{t_1}^{t_2} dt \dot{p}_i \delta q_i,$$

wobei wir ausnutzen, daß alle variierten Wege die gleichen festen Endpunkte haben ($\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0$). Für Gleichung (5.1.24) folgt dann

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \sum_i [\delta p_i \dot{q}_i - \dot{p}_i \delta q_i - \frac{\partial H}{\partial q_i}\delta q_i - \frac{\partial H}{\partial p_i}\delta p_i] dt =$$

$$\int_{t_1}^{t_2} \sum_i \Big([\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i}]\delta p_i - [\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i}]\delta q_i \Big) dt = 0 \tag{5.1.25}$$

Da die Variationen δq_i und δp_i unabhängig sind, kann das Integral nur verschwinden, wenn die Koeffizienten einzeln verschwinden, d.h.

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{5.1.26}$$

es folgen die kanonischen Bewegungsgleichungen.

Die Forderung nach unabhängiger Variation von q_i und p_i, die so wesentlich für die obige Ableitung ist, beleuchtet den fundamentalen Unterschied zwischen der Lagrangeschen und Hamiltonschen Formulierung:

Im Lagrange-Verfahren müssen die generalisierten Koordinaten q_i und die generalisierten Geschwindigkeiten $\dot{q}_i$ am Anfang angegeben werden, um die Bewegung des Systems vollständig zu bestimmen. Aber die $\dot{q}_i$ wurden stets als *abhängige* Variablen betrachtet, eng verknüpft mit den q_i durch ihre zeitliche Ableitung. Bei der Herleitung der Lagrange-Gleichung wurde die Variation $\delta\dot{q}_i$ durch die unabhängige Variation δq_i mittels einer partiellen Integration nach der Zeit ausgedrückt. Dies führte auf eine zweite Ableitung der Lagrange-Funktion L und folglich auf Bewegungsgleichungen 2. Ordnung.

Wir erhalten Gleichungen erster Ordnung aus dem modifizierten Hamilton-Prinzip nur deshalb, weil die Variation δp_i, anders als $\delta\dot{q}_i$, als *unabhängig* von δq_i angesehen werden. Die Impulse mußten deshalb auf den gleichen Status wie die Koordinaten gehoben werden; beide sind gleichberechtigte unabhängige Variablen, die *nur durch die Bewegungsgleichungen selbst* und keine a-priori definierte Beziehung verbunden sind. Nur wenn die Menge der unabhängigen Variablen von s auf $2s$ Größen erweitert wird, sind wir in der Lage Bewegungsgleichungen zu erhalten, die von erster Ordnung sind.

5.2 Poisson-Klammern

Es sei eine Funktion $f = f(\vec{q}, \vec{p}, t)$ gegeben. Solche Funktionen stellen beispielsweise meßbare, physikalische Größen (”Observable”) dar. Die totale zeitliche Ableitung lautet dann

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^{s}\Big(\frac{\partial f}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i}\dot{p}_i\Big) \tag{5.2.1}$$

Mit den Hamilton-Bewegungsgleichungen (5.1.10) – (5.1.11) folgt

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^{s}\Big(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\Big) \tag{5.2.2}$$

Definition : Wir definieren die *Poisson-Klammer* von f und H durch

$$\big[f, H\big] \equiv \sum_{i=1}^{s}\Big(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\Big). \tag{5.2.3}$$

Damit schreibt sich Gleichung (5.2.2) als

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \big[f, H\big] \tag{5.2.4}$$

Falls f nicht explizit von der Zeit abhängt $((\partial f/\partial t) = 0)$, gilt

$$\frac{df}{dt} = \big[f, H\big]$$

Es liegt also ein Integral der Bewegung oder eine Erhaltungsgröße vor, d.h. die Meßgröße ist zeitlich konstant, $\frac{df}{dt} = 0$, wenn

$$\big[f, H\big] = 0 \tag{5.2.5}$$

die Poisson-Klammer von f mit der Hamilton-Funktion H verschwindet.
Analog zur Definition (5.2.3) führen wir die allgemeine Poisson-Klammer für ein beliebiges Paar von Funktionen ein durch

$$\big[f, g\big] \equiv \sum_{i=1}^{s}\Big(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i}\Big). \tag{5.2.6}$$

5.2.1 Eigenschaften der allgemeinen Poisson-Klammer

Seien die Funktionen f_1, f_2, f, g, h und die Konstante $c = const.$ gegeben. Aus der Definition (5.2.6) beweist man sofort durch Einsetzen folgende Eigenschaften der Poisson-Klammer:
(a) Antisymmetrie

$$\big[f, g\big] = -\big[g, f\big] \tag{5.2.7}$$

mit der Folgerung

$$\big[f, f\big] = -\big[f, f\big] = 0 \tag{5.2.8}$$

(b)

$$\big[f, c\big] = 0 \tag{5.2.9}$$

(c) Bilininearität

$$\left[f_1 + f_2, g\right] = \left[f_1, g\right] + \left[f_2, g\right] \tag{5.2.10}$$

(d)

$$\left[f_1 \cdot f_2, g\right] = f_1\left[f_2, g\right] + f_2\left[f_1, g\right] \tag{5.2.11}$$

(e)

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[f, g\right] = \left[\frac{\partial f}{\partial t}, g\right] + \left[f, \frac{\partial g}{\partial t}\right] \tag{5.2.12}$$

(f) Schwieriger zu beweisen ist die *Jacobi-Identität*:

$$\left[f, \left[g, h\right]\right] + \left[g, \left[h, f\right]\right] + \left[h, \left[f, g\right]\right] = 0 \tag{5.2.13}$$

5.2.2 Spezielle Fälle von Poisson-Klammern

Es ist

1)

$$\left[f, q_k\right] = -\frac{\partial f}{\partial p_k}$$

weil $(\partial q_k / \partial p_i) = 0$

2) Ebenso gilt

$$\left[f, p_k\right] = \frac{\partial f}{\partial q_k}$$

3)

$$\left[q_i, q_k\right] = 0$$

4)

$$\left[p_i, p_k\right] = 0$$

5)

$$\left[p_i, q_k\right] = \sum_{n=1}^{s}\left(\frac{\partial p_i}{\partial q_n}\frac{\partial q_k}{\partial p_n} - \frac{\partial p_i}{\partial p_n}\frac{\partial q_k}{\partial q_n}\right) = 0 - \sum_{n=1}^{s}\delta_{in}\delta_{kn} = -\delta_{ik}$$

und

$$\left[q_i, p_j\right] = \delta_{ij},$$

wobei δ_{ik} das Kronecker-Symbol (1.2.6) bezeichnet.

Die kanonischen Bewegungsgleichungen ergeben sich dann mit (5.1.10) – (5.1.11) als

$$\left[p_k, H\right] = \sum_{n=1}^{s}\left(\frac{\partial p_k}{\partial q_n}\frac{\partial H}{\partial p_n} - \frac{\partial p_k}{\partial p_n}\frac{\partial H}{\partial q_n}\right) = -\frac{\partial H}{\partial q_k} = \dot{p}_k$$

also

$$\dot{p}_k = \Big[p_k, H\Big] \tag{5.2.14}$$

und

$$\Big[q_k, H\Big] = \sum_{n=1}^{s}\Big(\frac{\partial q_k}{\partial q_n}\frac{\partial H}{\partial p_n} - \frac{\partial q_k}{\partial p_n}\frac{\partial H}{\partial q_n}\Big) = \frac{\partial H}{\partial p_k} = \dot{q}_k$$

also

$$\dot{q}_k = \Big[q_k, H\Big] \tag{5.2.15}$$

5.2.3 Poisson-Theorem

Das Poisson-Theorem ist hilfreich, bei bekannten Bewegungsintegralen weitere zu finden.
Poisson-Theorem: Für alle f und g mit

$$\frac{df}{dt} = \frac{dg}{dt} = 0$$

gilt

$$\Big[f, g\Big] = const., \tag{5.2.16}$$

d.h. $\Big[f, g\Big]$ ist Bewegungsintegral.
Beweis: Nach (5.2.4) gilt

$$\frac{d}{dt}\Big[f, g\Big] = \frac{\partial\Big[f, g\Big]}{\partial t} + \Big[\Big[f, g\Big], H\Big]$$

Nutzen wir die Beziehungen (5.2.7), (5.2.10), (5.2.12) und (5.2.13) auf der rechten Seite dieser Gleichung, so folgt

$$\frac{d}{dt}\Big[f, g\Big] = \Big[\frac{\partial f}{\partial t}, g\Big] + \Big[f, \frac{\partial g}{\partial t}\Big] - \Big[H, \Big[f, g\Big]\Big] = \Big[\frac{\partial f}{\partial t}, g\Big] + \Big[f, \frac{\partial g}{\partial t}\Big] + \Big[f, \Big[g, H\Big]\Big] + \Big[g, \Big[H, f\Big]\Big]$$
$$= \Big[\frac{\partial f}{\partial t}, g\Big] + \Big[f, \frac{\partial g}{\partial t}\Big] + \Big[f, \Big[g, H\Big]\Big] + \Big[\Big[f, H\Big], g\Big] = \Big[\frac{\partial f}{\partial t} + \Big[f, H\Big], g\Big] + \Big[f, \frac{\partial g}{\partial t} + \Big[g, H\Big]\Big]$$
$$= \Big[\frac{df}{dt}, g\Big] + \Big[f, \frac{dg}{dt}\Big] = \Big[0, g\Big] + \Big[f, 0\Big] = 0,$$

also $\Big[f, g\Big] = const.$
Q.E.D.
Sind also zwei Bewegungsintegrale gefunden, kann man so weitere Bewegungsintegrale konstruieren.

5.3 Kanonische Transformationen

Unsere bisherige Erfahrung lehrt uns, daß für die Lösbarkeit mechanischer Probleme die Wahl der Koordinaten entscheidend ist. Wir suchen daher nach einer Darstellung, in der möglichst viele (oder sogar alle) Koordinaten zyklisch sind. Diese liefern dann jeweils konstante konjugierte Impulse als Erhaltungsgrößen, sodaß sich das mechanische Problem enorm vereinfacht.

Definition: Integrables System: Bei einem integrablen System sind alle Ortskoordinaten zyklisch. Dann gilt für alle konjugierten Impulse

$$p_k = \alpha_k = const. \tag{5.3.1}$$

Sei außerdem die Hamilton-Funktion eine Konstante der Bewegung. Die Hamilton-Funktion ist dann weder eine explizite Funktion der Zeit noch der zyklischen Koordinaten, d.h.

$$H = H(\alpha_1, ..., \alpha_n) \tag{5.3.2}$$

Als Folge erhalten wir für die kanonische Gleichung (5.1.11)

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{\partial H}{\partial \alpha_i} = \omega_i = \omega_i(\alpha_1, ...\alpha_n) \tag{5.3.3}$$

Die ω_i sind wieder zeitlich konstant, da sie nur von den α_i abhängen. Als Lösung der Bewegungsgleichung (5.3.3) ergibt sich

$$q_i = \omega_i t + \beta_i, \tag{5.3.4}$$

wobei die Integrationskonstanten β_i aus den Anfangsbedingungen folgen.

Wir suchen also eine Transformation für die Koordinaten, die es erlaubt, die Lösung so einfach wie in Gleichung (5.3.4) zu formulieren:

$$Q_j = Q_j(\vec{q}, \vec{p}, t) \tag{5.3.5}$$

$$P_j = P_j(\vec{q}, \vec{p}, t) \tag{5.3.6}$$

Anders als früher (Kap. 3.6.3) ändert sich die Anzahl der unabhängigen Koordinaten nicht mehr (keine neuen Zwangsbedingungen). Die einzige Bedingung an die Transformationen (5.3.5) – (5.3.6) ist, daß sie die Form der kanonischen Bewegungsgleichungen beibehalten, d.h.

$$\dot{P}_j = -\frac{\partial \bar{H}}{\partial Q_j}, \tag{5.3.7}$$

$$\dot{Q}_j = \frac{\partial \bar{H}}{\partial P_j}. \tag{5.3.8}$$

Allerdings kann sich die Hamilton-Funktion bei der Transformation ändern

$$H(\vec{q}, \vec{p}, t) \to \bar{H}(\vec{Q}, \vec{P}, t) \tag{5.3.9}$$

Diese Transformationen heißen *kanonische Transformationen*, weil sie die Form der kanonischen Gleichungen invariant lassen.

5.3.1 Erzeugende Funktion

Die Forderung, daß die Form der kanonischen Gleichungen und nicht die Hamilton-Funktion invariant bleiben, ist darauf zurückzuführen, daß die Bewegungsgleichungen das Äquivalent zu den Lagrange-Gleichungen sind und sich damit aus dem Hamilton-Prinzip herleiten lassen. Das Hamilton-Prinzip der stationären Wirkung muß weiterhin gültig sein und zwar in beiden Formulierungen $(\vec{q}, \vec{p}, t)$ und $(\vec{Q}, \vec{P}, t)$.
Nach Gleichung (5.1.8) ist

$$L = \sum_k p_k \dot{q}_k - \ H(\vec{q}, \vec{p}, t) \tag{5.3.10}$$

Damit erscheint das Hamilton-Prinzip (5.1.23) mit $dq_k = \dot{q}_k dt$ in der Form

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} [\sum_j p_j dq_j - H dt] = \delta \sum_j \int_{t_1}^{t_2} [\sum_j P_j dQ_j - \bar{H} dt] = 0 \tag{5.3.11}$$

Wegen der festgehaltenen Randwerte der Integration können sich beide Integranden nur um die totale Zeitableitung einer beliebigen Funktion $F(\vec{q}, \vec{p}, \vec{Q}, \vec{P}, t)$ unterscheiden,

$$L - \bar{L} = \frac{dF}{dt}, \tag{5.3.12}$$

denn $\delta[F(t_2) - F(t_1)] = 0$, weil

$$\delta[\int_{t_1}^{t_2} \frac{dF}{dt} dt] = \delta[F(t_2) - F(t_1)] = 0$$

wegen $\delta F(t_2) = \delta F(t_1) = 0$. Aus den Gleichungen (5.3.10) und (5.3.12) folgt also

$$\sum_j p_j dq_j - \ H(\vec{q}, \vec{p}, t) dt = \sum_j P_j dQ_j - \ \bar{H}(\vec{Q}, \vec{P}, t) dt + \ dF(\vec{q}, \vec{Q}, t) \tag{5.3.13}$$

mit

$$dF = \frac{\partial F}{\partial t} dt + \sum_j \frac{\partial F}{\partial q_j} dq_j + \sum_j \frac{\partial F}{\partial Q_j} dQ_j \tag{5.3.14}$$

Die *erzeugende Funktion* F ist im allgemeinen eine Funktion $F = F(\vec{q}, \vec{p}, \vec{Q}, \vec{P}, t)$ der "neuen" und "alten" Koordinaten, also von $4n$ Variablen. Die konjugierten Impulse sind

aber über ihre zeitliche Ableitung gemäß den kanonischen Gleichungen durch die Ableitung der Hamilton-Funktion (aus der bekannten Lagrange-Funktion) nach $\vec{q}$ und $\vec{Q}$ schon implizit durch $F_1(\vec{q}, \vec{Q}, t)$ gegeben. Von den $4n$ Variablen sind nur $2n$ unabhängig voneinander, daher können wir die erzeugende Funktion in einer der folgenden vier Formen schreiben:
(a) $F_1(q_i, Q_i, t)$
(b) $F_2(q_i, P_i, t)$
(c) $F_3(p_i, Q_i, t)$
(d) $F_4(p_i, P_i, t)$
je nach Art des Problems.
Ist zum Beispiel die erste Form F_1 geeignet, so folgt aus Gleichung (5.3.14)

$$\frac{dF_1}{dt} = \frac{\partial F_1}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial F_1}{\partial q_j}\dot{q}_j + \sum_j \frac{\partial F_1}{\partial Q_j}\dot{Q}_j$$

Setzen wir dies in Gleichung (5.3.13) ein, erhalten wir

$$\sum_j p_j\dot{q}_j - H(\vec{q}, \vec{p}, t) = \sum_j P_j\dot{Q}_j - \bar{H}(\vec{Q}, \vec{P}, t) + \frac{\partial F_1}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial F_1}{\partial q_j}\dot{q}_j + \sum_j \frac{\partial F_1}{\partial Q_j}\dot{Q}_j,$$

oder nach Umstellen

$$\sum_j (p_j - \frac{\partial F_1}{\partial q_j})\dot{q}_j = \sum_j (P_j + \frac{\partial F_1}{\partial Q_j})\dot{Q}_j + H(\vec{q}, \vec{p}, t) - \bar{H}(\vec{Q}, \vec{P}, t) + \frac{\partial F_1}{\partial t} \tag{5.3.15}$$

Da die alten (q_j) und neuen (Q_j) Koordinaten hier als unabhängig angesehen werden, müssen die Koeffizienten der $\dot{q}_j$ und $\dot{Q}_j$ einzeln verschwinden, d.h.

$$p_j = \frac{\partial F_1}{\partial q_j} = p_j(q, Q, t), \tag{5.3.16}$$

$$P_j = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_j} = P_j(q, Q, t), \tag{5.3.17}$$

sodaß

$$\bar{H} = H + \frac{\partial F_1(q, Q, t)}{\partial t} \tag{5.3.18}$$

übrig bleibt.
Man kann die $2n$ Gleichungen (5.3.16) – (5.3.17) nach $q = q(Q, P, t)$ und $p = p(Q, P, t)$ auflösen. Setzt man diese auf der rechten Seite von Gleichung (5.3.18) ein, so folgt die neue Hamilton-Funktion $\bar{H}(Q, P, t)$.
Als nächstes behandeln wir die Transformationsgleichungen für eine Erzeugende vom Typ $F_2(q, P, t)$. Diese läßt sich durch eine Legendre-Transformation aus F_1 ableiten, da nach Gleichung (5.3.17) $P_j = -(\partial F_1/\partial Q_j)$ ist; es gilt also

$$F_2(q,P,t) = F_1(q,Q,t) + \sum_j P_j Q_j \tag{5.3.19}$$

Dann erhalten wir für Gleichung (5.3.13)

$$\sum_j p_j \dot{q}_j - \ H(\vec{q},\vec{p},t) = \sum_j P_j \dot{Q}_j - \ \bar{H}(\vec{Q},\vec{P},t) + \ \frac{dF_1}{dt} =$$

$$\sum_j P_j \dot{Q}_j - \ \bar{H}(\vec{Q},\vec{P},t) + \frac{d}{dt}[F_2(q,P,t) - \sum_j P_j Q_j]$$

Daraus folgt

$$\sum_j p_j \dot{q}_j - \sum_j P_j \dot{Q}_j - H + \bar{H} = \frac{\partial F_2}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial F_2}{\partial q_j}\dot{q}_j + \sum_j \frac{\partial F_2}{\partial P_j}\dot{P}_j - \sum_j \dot{P}_j Q_j - \sum_j P_j \dot{Q}_j$$

oder

$$\sum_j p_j \dot{q}_j + \sum_j \dot{P}_j Q_j - H + \bar{H} = \frac{\partial F_2}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial F_2}{\partial q_j}\dot{q}_j + \sum_j \frac{\partial F_2}{\partial P_j}\dot{P}_j \tag{5.3.20}$$

Der Koeffizientenvergleich ergibt

$$p_j = \frac{\partial F_2(q,P,t)}{\partial q_j}, \tag{5.3.21}$$

$$Q_j = \frac{\partial F_2(q,P,t)}{\partial P_j}, \tag{5.3.22}$$

$$\bar{H}(P_i,Q_i,t) = H(p_i,q_i,t) + \frac{\partial F_2(q,P,t)}{\partial t} \tag{5.3.23}$$

Ähnlich verfährt man mit den Erzeugenden F_3 und F_4 (Übungsaufgaben).
$F_3(p,Q,t)$ erhält man aus $F_1(q,Q,t)$ durch die Legendre-Transformation

$$F_3(p,Q,t) = -\sum_j q_j p_j + F_1(q,Q,t), \tag{5.3.24}$$

weil nach Gleichung (5.3.16) $p_j = (\partial F_1/\partial q_j)$. Damit erhält man als Transformationsgleichungen

$$q_j = -\frac{\partial F_3(p,Q,t)}{\partial p_j}, \quad P_j = -\frac{\partial F_3(p,Q,t)}{\partial Q_j}, \quad \bar{H} = H + \frac{\partial F_3(p,Q,t)}{\partial t} \tag{5.3.25}$$

$F_4(p,P,t)$ erhält man aus $F_1(q,Q,t)$ durch die doppelte Legendre-Transformation

$$F_4(p,P,t) = F_1(q,Q,t) + \sum_j P_j Q_j - \sum_j q_j p_j \tag{5.3.26}$$

Als Transformationsgleichungen ergeben sich in diesem Fall

$$q_j = -\frac{\partial F_4(p,P,t)}{\partial p_j}, \quad Q_j = \frac{\partial F_4(p,P,t)}{\partial P_j}, \quad \bar{H} = H + \frac{\partial F_4(p,P,t)}{\partial t} \tag{5.3.27}$$

In Tabelle 5.1 haben wir die Transformationseigenschaften der vier Erzeugenden zusammengefaßt. In allen Fällen ist

$$\bar{H} = H + \frac{\partial F_i}{\partial t}, \quad i = 1,2,3,4 \tag{5.3.28}$$

Tabelle 5.1 Transformationseigenschaften der erzeugenden Funktionen

	Q	P
q	$F_1(q,Q,t)$ $p_j = \frac{\partial F_1}{\partial q_j}$, $P_j = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_j}$	$F_2(q,P,t)$ $p_j = \frac{\partial F_2}{\partial q_j}$, $Q_j = \frac{\partial F_2}{\partial P_j}$
p	$F_3(p,Q,t)$ $q_j = -\frac{\partial F_3}{\partial p_j}$, $P_j = -\frac{\partial F_3}{\partial Q_j}$	$F_4(p,P,t)$ $q_j = -\frac{\partial F_4}{\partial p_j}$, $Q_j = \frac{\partial F_4}{\partial P_j}$

5.3.2 Beispiele kanonischer Transformationen

(a) Identische Transformation:
Die Transformation

$$F_2(q,P,t) = \sum_j q_j P_j \tag{5.3.29}$$

heißt identische Transformation, denn nach Gleichungen (5.3.21) – (5.3.23) sind dann

$$p_j = \frac{\partial F_2(q,P,t)}{\partial q_j} = P_j,$$

$$Q_j = \frac{\partial F_2(q,P,t)}{\partial P_j} = q_j$$

die neuen und alten Koordinaten gleich, ebenso wie die alte und neue Hamilton-Funktion $\bar{H} = H$.
(Übungsaufgabe: Zeigen Sie, daß auch $F_3 = -\sum_j p_j Q_j$ die identische Transformation ergibt.)

(b) Punkttransformation:
Sei

$$F_2(q,P,t) = \sum_k f_k(q_1, ..., q_s, t) P_k \tag{5.3.30}$$

Nach den Transformationsgleichungen (5.3.21) – (5.3.22) ergibt sich

$$p_j = \frac{\partial F_2(q,P,t)}{\partial q_j} = \sum_k \frac{\partial f_k}{\partial q_j} P_j$$

und

$$Q_j = f_j(q_1, ..., q_s, t),$$

d.h. hier hängen die neuen Koordinaten nur von den alten Koordinaten und der Zeit ab, nicht aber von alten Impulsen. Solche Transformationen beteichnet man als Punkttransformationen. Da die f_k beliebig sind, folgt, daß *alle Punkttransformationen kanonisch sind.* Nach Gleichung (5.3.23) enthält die neue Hamilton-Funktion die Zeitableitung $(\partial f_k/\partial t)$ der Funktionen f_k.

(c) Vertauschungstransformation:
Die Transformation

$$F_1(q,Q,t) = \sum q_j Q_j \tag{5.3.31}$$

vertauscht die Rolle von Impulsen und Koordinaten, denn aus den Transformationsgleichungen (5.3.16) – (5.3.17) folgt

$$p_j = \frac{\partial F_1}{\partial q_j} = Q_j$$

und

$$P_j = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_j} = -q_j$$

Dieses Beispiel zeigt sehr schön die Gleichwertigkeit von Begriffen wie Koordinaten und Impulse in der Hamilton-Mechanik.
(Übungsaufgabe: Zeigen Sie, daß auch $F_4 = -\sum_j p_j P_j$ die Vertauschungstransformation ergibt.)

(d) Spezielle Transformation:
Für spätere Diskussion betrachten wir die Erzeugende

$$F_1(q,Q,t) = \frac{m}{2}\omega q^2 \cot Q, \tag{5.3.32}$$

wobei m und ω Konstanten bezeichnen. Aus den Transformationsgleichungen (5.3.16) – (5.3.17) erhalten wir dann

$$p = \frac{\partial F_1}{\partial q} = m\omega q \cot Q$$

und

$$P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} = -\frac{m}{2}\omega q^2 \frac{1}{-\sin^2 Q} = \frac{m\omega q^2}{2\sin^2 Q}$$

oder

$$q = \sqrt{\frac{2P}{m\omega}} \sin Q \tag{5.3.33}$$

und damit

$$p = m\omega\sqrt{\frac{2P}{m\omega}} \sin Q \frac{\cos Q}{\sin Q} = \sqrt{2m\omega P}\cos Q \tag{5.3.34}$$

Da die Erzeugende (5.3.32) die Zeit nicht enthält, folgt aus Gleichung (5.3.18) für die neue Hamilton-Funktion

$$\bar{H}(Q,P) = H(q(Q,P), p(Q,P)) \tag{5.3.35}$$

Wir wenden diese spezielle Erzeugende auf den Fall des linearen harmonischen Oszillator an.

5.3.3 Anwendung: linearer harmonischer Oszillator

Mit $V = (k/2)q^2$ gilt für die Hamilton-Funktion des linearen harmonischen Oszillators

$$H = T + V = \frac{m}{2}\dot{q}^2 + \frac{kq^2}{2} = \frac{p^2}{2m} + \frac{kq^2}{2}$$

Mit $k = m\omega^2$ folgt

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} \tag{5.3.36}$$

Wir transformieren jetzt auf neue Variable (Q, P) mittels der Erzeugenden (5.3.32). Setzen wir Gleichungen (5.3.33) und (5.3.34) gemäß Beziehung (5.3.35) ein, so erhalten wir eine besonders einfache neue Hamilton-Funktion:

$$\bar{H} = H = \frac{1}{2m} 2m\omega P\cos^2 Q + \frac{m\omega^2}{2}\frac{2P}{m\omega}\sin^2 Q = \omega P[\cos^2 Q + \sin^2 Q] = \omega P \tag{5.3.37}$$

Die neue Hamilton-Funktion ist zyklisch in Q. Aus der kanonischen Gleichung (5.3.7)

$$\dot{P} = -\frac{\partial \bar{H}}{\partial Q} = 0$$

folgt

$$P = const. = P_0 = E\omega$$

Gleichzeitig folgt aus der kanonischen Gleichung (5.3.8)

$$\dot{Q} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial P} = \omega,$$

sodaß sich

$$Q(t) = \omega t + \alpha$$

als allgemeine Lösung ergibt. Aus Gleichung (5.3.33) erhalten wir damit

$$q(t) = \sqrt{\frac{2P_0}{m\omega}} \sin(\omega t + \alpha) = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \sin(\omega t + \alpha) \tag{5.3.38}$$

die bekannte Lösung (2.4.22) (mit $a = \sqrt{2E/k} = \sqrt{2E/m\omega^2}$). Die Frage, wie wir auf die Erzeugende (5.3.32) gekommen sind, werden wir später beantworten (siehe Kap. 5.4.3).

5.3.4 Kriterien für Kanonizität

Wie erkennt man nun, ob eine Transformation

$$P_j = P_j(\vec{q}, \vec{p}, t), \quad Q_j = Q_j(\vec{q}, \vec{p}, t) \tag{5.3.39}$$

kanonisch ist, wenn die zugehörige erzeugende Funktion nicht explizit bekannt ist?
Satz: Die Phasentransformation (5.3.39) ist genau dann kanonisch, wenn die fundamentalen Poissonklammern in den neuen Variablen

$$\left[Q_i, P_j\right] = \delta_{ij}, \tag{5.3.40}$$

$$\left[Q_i, Q_j\right] = \left[P_i, P_j\right] = 0 \tag{5.3.41}$$

erfüllt sind.
Den Beweis für nicht explizit zeitabhängige erzeugende Funktionen findet sich im Band 2 des Mechanik-Buches von Nolting (Übungsaufgabe).

5.4 Hamilton-Jacobi-Gleichung

Auf welche Weise muß eine Hamilton-Funktion H transformiert werden, damit die Lösung eines möglichen physikalischen Problems möglichst einfach wird?

Eine mögliche Transformation besteht darin, so zu transformieren, daß in den neuen Variablen (Q, P) die transformierte Hamilton-Funktion $\bar{H}$ ein bekanntes, bereits gelöstes Problem darstellt (z. B. den harmonischen Oszillator).

Noch einfacher wird die Lösung, wenn die neue Hamilton-Funktion gänzlich verschwindet. Dann ist die Lösung der neuen kanonischen Gleichungen (5.3.7) – (5.3.8) trivial, nämlich

$$\dot{P}_j = -\frac{\partial \bar{H}}{\partial Q_j} = 0 \quad \rightarrow P_j = \alpha_j = const., \quad j = 1, \ldots.., s, \tag{5.4.1}$$

$$\dot{Q}_j = \frac{\partial \bar{H}}{\partial P_j} = 0 \quad \rightarrow Q_j = \beta_j = const., \quad j = 1, \ldots.., s. \tag{5.4.2}$$

Deshalb bestimmen wir hier diejenige kanonische Transformation F, für die die neue Hamilton-Funktion verschwindet. Gemäß Gleichung (5.3.28) muß dann gelten

$$\bar{H}(Q, P, t) = H(q, p, t) + \frac{\partial F}{\partial t} = 0 \tag{5.4.3}$$

Diese Bedingung führt zu einer partiellen Differentialgleichung für F, der *Hamilton-Jacobi-Gleichung*.

Es ist zweckmäßig, aber keinesfalls notwendig, die Erzeugende vom Typ $F_2 = F_2(q, P, t)$ zu wählen. Dann gilt nach den Transformationsgleichungen (5.3.21) – (5.3.22):

$$p_j = \frac{\partial F_2(q, P, t)}{\partial q_j}, \quad Q_j = \frac{\partial F_2(q, P, t)}{\partial P_j}. \tag{5.4.4}$$

Setzen wir dies in die rechte Seite von Gleichung (5.4.3) ein, so ergibt sich die Hamilton-Jacobi-Differentialgleichung (HJD) zu

$$H(q_1, \ldots\ldots, q_s, \frac{\partial F_2}{\partial q_1}, \ldots\ldots, \frac{\partial F_2}{\partial q_s}, t) + \frac{\partial F_2}{\partial t} = 0 \tag{5.4.5}$$

Es ist manchmal einfacher, diese HJD anstatt der Bewegungsgleichungen zu lösen.

5.4.1 Anmerkungen zur Hamilton-Jacobi-Gleichung und Lösungsverfahren

(1) Wir berechnen die totale Zeitableitung von F_2:

$$\frac{dF_2}{dt} = \frac{\partial F_2}{\partial t} + \sum_{j=1}^{s} \Big[\frac{\partial F_2}{\partial q_j}\dot{q}_j + \frac{\partial F_2}{\partial P_j}\dot{P}_j\Big]$$

Mit Gleichungen (5.4.1) und (5.4.4a) ergibt sich

$$\frac{dF_2}{dt} = \frac{\partial F_2}{\partial t} + \sum_{j=1}^{s} p_j \dot{q}_j = \sum_{j=1}^{s} p_j \dot{q}_j - H(q, p, t) = L, \tag{5.4.6}$$

wobei wir Gleichungen (5.4.3) und (5.1.8) verwendet haben. Integrieren wir Gleichung (5.4.6), so erhalten wir

$$F_2 = \int dt L(p,q,t) + \ const. = S + \ const. \tag{5.4.7}$$

Bis auf eine Konstante ist die erzeugende Funktion F_2 gleich der Wirkungsfunktion $S = \int dtL$, die beim Hamilton-Prinzip minimiert wurde. Deshalb heißt

$$F_2(q,P,t) = S(q,P,t) \tag{5.4.8}$$

Hamiltonsche Wirkungsfunktion.

(2) Die HJD (5.4.5) ist eine nichtlineare Differentialgleichung 1. Ordnung für F_2 in den $(s+1)$ Variablen $q_1, ..., q_s, t$. Sie ist nichtlinear, da H im allgemeinen quadratisch von den Impulsen p_j und damit von $(\partial F_2/\partial q_j)$ abhängt. Es treten nur partielle Ableitungen 1. Ordnung nach den q_j und nach t auf.

(3) Die HJD enthält $(s+1)$-verschiedene Ableitungen der gesuchten Funktion F_2. Nach der Integration der Gleichung erhalten wir demnach $(s+1)$ Integrationskonstanten. Da die HJD F_2 nur in der Form $(\partial F_2/\partial q_j)$ oder $(\partial F_2/\partial t)$ enthält, ist mit F_2 auch stets $F_2 +$ *const.* Lösung. Von den Integrationskonstanten ist also eine trivial additiv. Die vollständige Lösung hat also die Gestalt

$$F_2(q_1, ...q_s, t|\alpha_1, ..., \alpha_s) + \ \alpha_{s+1} \tag{5.4.9}$$

α_{s+1} ist unwichtig, da die Transformationsformeln (5.4.4) nur die Ableitungen von F_2 enthalten.

(4) Die HJD bestimmt nur die q_j- und t-Abhängigkeiten der Lösung $F_2 = F_2(q_j, P_j, t)$ und macht keine Aussagen über die Impulse P_j. Wir wissen aber aus Gleichung (5.4.1), daß die Impulse konstant sind, und haben deshalb die Freiheit, die Integrationskonstanten mit den neuen Impulsen zu identifizieren:

$$P_j = \alpha_j, \quad j = 1, ..., s \tag{5.4.10}$$

Aus diesen Überlegungen konstruieren wir das folgende *Lösungsverfahren*:
(a) Man formuliere $H = H(\vec{q}, \vec{p}, t)$, setze $p_j = \frac{\partial F_2}{\partial q_j}$ ein und stelle die HJD auf.

(b) Man löse die HJD für F_2:

$$F_2 = S(q_1, ..., q_s, t|\alpha_1, ..., \alpha_s)$$

und identifiziere die Integrationskonstanten mit den *neuen* Impulsen:

$$P_j = \alpha_j, \quad j = 1, ..., s$$

(c) Man setze nach Gleichung (5.4.4b)

$$Q_j = \frac{\partial S(\vec{q},t|\vec{\alpha})}{\partial \alpha_j} = Q_j(\vec{q},t|\vec{\alpha}) = \beta_j, \quad j = 1, ..., s \tag{5.4.11}$$

Das sind s-Gleichungen, die nach den alten Koordinaten $q_1, ..., q_s$ aufzulösen sind:

$$q_j = q_j(t|\beta_1, ..., \beta_s, \alpha_1, ..., \alpha_s) = q_j(t|\vec{\beta}, \vec{\alpha}), \quad j = 1, ..., s \tag{5.4.12}$$

(d) Man berechne die alten Impulse aus Gleichung (5.4.4a)

$$p_j = \frac{\partial S(\vec{q},t|\vec{\alpha})}{\partial q_j} = p_j(\vec{q},t|\vec{\alpha}), \quad j = 1, ..., s \tag{5.4.13}$$

und setze die Koordinaten aus Gleichung (5.4.12) ein:

$$p_j = p_j(t|\beta_1, ..., \beta_s, \alpha_1, ..., \alpha_s) = p_j(t|\vec{\beta}, \vec{\alpha}), \quad j = 1, ..., s \tag{5.4.14}$$

(e) Die Anfangsbedingungen $q_j^{(0)} = q_j(t = t_0)$, $p_j^{(0)} = p_j(t = t_0)$, $j = 1, ..., s$ liefern über (5.4.12) und (5.4.14)

$$\vec{\alpha} = \vec{\alpha}(t_0|\vec{p}^{(0)}, \vec{q}^{(0)}), \quad \vec{\beta} = \vec{\beta}(t_0|\vec{p}^{(0)}, \vec{q}^{(0)}),$$

die dann wiederum in (5.4.12) und (5.4.14) eingesetzt werden, womit das mechanische Problem vollständig gelöst ist.
Wir illustrieren das Verfahren am Beispiel des linearen harmonischen Oszillators.

5.4.2 Beispiel des Lösungsverfahrens: Der lineare harmonische Oszillator

(a) Nach Gleichung (5.3.36) ist die Hamilton-Funktion mit $k = m\omega^2$ durch

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega q^2}{2}$$

gegeben. Wir setzen $p = (\partial S/\partial q)$ und erhalten als HJD nach Gleichung (5.4.5)

$$\frac{1}{2m}(\frac{\partial S}{\partial q})^2 + \frac{m\omega^2 q^2}{2} + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \tag{5.4.15}$$

(b) Wegen der t-Abhängigkeit nur im letzten Term von Gleichung (5.4.15) machen wir den Ansatz

$$S(q, P, t) = W(q|P) - \alpha t \tag{5.4.16}$$

mit der Integrationskonstanten α und erhalten die Gleichung

$$\frac{1}{2m}(\frac{dW}{dq})^2 + \frac{m\omega^2 q^2}{2} = \alpha$$

für die Funktion $W(q|P)$. Es folgt

$$\frac{dW}{dq} = m\omega\sqrt{\frac{2\alpha}{m\omega^2} - q^2}$$

und nach Integration

$$W = m\omega \int dq \sqrt{\frac{2\alpha}{m\omega^2} - q^2} + const.$$

Für die Lösung der HJD (5.4.16) folgt

$$S(q,\alpha,t) = m\omega \int dq \sqrt{\frac{2\alpha}{m\omega^2} - q^2} - \alpha t + const. =$$

$$m\omega[\frac{q}{2}\sqrt{\frac{2\alpha}{m\omega^2} - q^2} + \frac{\alpha}{m\omega^2} \arcsin(q\sqrt{\frac{m\omega^2}{2|\alpha|}})] - \alpha t + const. \tag{5.4.17}$$

Der neue Impuls ist

$$P = \alpha \tag{5.4.18}$$

(c) Wir setzen

$$Q = \frac{\partial S}{\partial \alpha} = \beta = const.$$

und erhalten mit Lösung (5.4.17)

$$\beta = \frac{1}{\omega}\int dq[\frac{2\alpha}{m\omega^2} - q^2]^{-1/2} - \ t$$

oder

$$\beta + t = \frac{1}{\omega}\arcsin(q\omega\sqrt{\frac{m}{2\alpha}}) \tag{5.4.19}$$

Wir lösen diese Gleichung nach q auf:

$$q = \frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2\alpha}{m}}\sin\omega(t+\beta) \tag{5.4.20}$$

Offensichtlich hat die neue Ortskoordinate $Q = \beta$ die Dimension Zeit.
(d) Den alten Impuls berechnen wir aus

$$p = \frac{\partial S}{\partial q} = \frac{dW}{dq} = m\omega\sqrt{\frac{2\alpha}{m\omega^2} - q^2} \tag{5.4.21}$$

und setzen Ergebnis (5.4.20) für q ein. Mit

$$\frac{2\alpha}{m\omega^2} - q^2 = \frac{2\alpha}{m\omega^2}[1 - \sin^2\omega(t+\beta)] = \frac{2\alpha}{m\omega^2}\cos^2\omega(t+\beta)$$

erhalten wir

$$p = \sqrt{2\alpha m}\cos\omega(t+\beta) \tag{5.4.22}$$

(e) Mit den Anfangsbedingungen bei $t = t_0 = 0$: $p^{(0)} = 0,\ q^{(0)} = q_0 \neq 0$ folgt aus Gleichung (5.4.21)

$$\alpha = \frac{1}{2}m\omega^2 q_0^2 = E \tag{5.4.23}$$

Da wir zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ nur potentielle Energie haben, ist nach Gleichung (5.4.23) α gleich der Gesamtenergie E des Systems. Gleichung (5.4.19) für $t = 0$ liefert dann mit (5.4.23)

$$\beta = \frac{1}{\omega}\arcsin(q_0\omega\sqrt{\frac{m}{m\omega^2 q_0^2}}) = \frac{1}{\omega}\arcsin(1) = \frac{\pi}{2\omega} \tag{5.4.24}$$

(f) Setzen wir die Ergebnisse (5.4.23) und (5.4.24) für α bzw. β in die Lösungen (5.4.20) und (5.4.22) ein, so folgen als vollständige Lösungen der Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} q(t) &= \frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E}{m}}\sin(\omega t + \frac{\pi}{2}) = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\cos\omega t, \\ p(t) &= \sqrt{2Em}\cos(\omega t + \frac{\pi}{2}) = -\sqrt{2Em}\sin\omega t \end{aligned} \tag{5.4.25}$$

5.4.3 Zusatzüberlegung

Die Lösung (5.4.17) ist eine Erzeugende vom Typ $F_2(q, P, t)$. Mit Hilfe der Ergebnisse können wir auch die entsprechende Erzeugende vom Typ $F_1(q, Q, t)$ aufstellen. Dazu erinnern wir uns, daß nach Gleichungen (5.3.16) – (5.3.17):

$$p_j = \frac{\partial F_1}{\partial q_j} \tag{5.3.16}$$

und

$$P_j = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_j} \tag{5.3.17}$$

Mit Gleichungen (5.4.18) und (5.4.19) folgt mit $\beta = Q$

$$P = \alpha = \frac{m\omega^2 q^2}{2\sin^2\omega(t+\beta)} = \frac{m\omega^2 q^2}{2\sin^2\omega(t+Q)}$$

Setzen wir dies in Gleichung (5.3.17) ein, erhalten wir

$$P = \frac{m\omega^2 q^2}{2\sin^2\omega(t+Q)} = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} \tag{5.4.26}$$

Dann folgt daraus mit Gleichung (5.4.22)

$$p = \sqrt{2\alpha m}\cos\omega(t+Q) = \sqrt{2Pm}\cos\omega(t+Q) = \frac{m\omega q\cos\omega(t+Q)}{\sin\omega(t+Q)} = \frac{\partial F_1}{\partial q} \tag{5.4.27}$$

nach Gleichung (5.3.16). Integrieren wir diese Gleichung bezüglich q, so folgt

$$F_1(q,Q,t) = \frac{1}{2}m\omega q^2\cot\omega(t+Q) + f_1(Q,t)$$

Leiten wir dieses Ergebnis nach Q ab:

$$\frac{\partial F_1}{\partial Q} = -\frac{1}{2}m\omega q^2\frac{\omega}{\sin^2\omega(t+Q)} + \frac{\partial f_1}{\partial Q}$$

und vergleichen mit Gleichung (5.4.26), so folgt

$$\frac{\partial f_1}{\partial Q} = 0,$$

sodaß

$$F_1(q,Q,t) = \frac{1}{2}m\omega q^2\cot\omega(t+Q) + f_1(t) \tag{5.4.28}$$

F_1 muß außerdem die HJD (5.4.15) des harmonischen Oszillators erfüllen, d.h.

$$\frac{1}{2m}(\frac{\partial F_1}{\partial q})^2 + \frac{m\omega^2q^2}{2} + \frac{\partial F_1}{\partial t} = 0$$

Mit Gleichungen (5.4.27) und (5.4.28) folgt dann

$$-\frac{\partial f_1}{\partial t} = \frac{m\omega^2q^2}{2}\cot^2\omega(t+Q) + \frac{m\omega^2q^2}{2} - \frac{m\omega^2q^2}{2\sin^2\omega(t+Q)} =$$
$$\frac{m\omega^2q^2}{2}[1 - \frac{1}{\sin^2\omega(t+Q)} + \frac{\cos^2\omega(t+Q)}{\sin^2\omega(t+Q)}] = 0,$$

sodaß bis auf eine unwesentliche additive Konstante

$$F_1(q,Q,t) = \frac{1}{2}m\omega q^2\cot\omega(t+Q) \tag{5.4.29}$$

Damit haben wir die Herkunft der Transformation (5.3.32) begründet.

5.5 Hamiltonsche charakteristische Funktion

Das Beispiel 5.4.2 konnte so einfach gelöst werden, weil die Erzeugende S (siehe Ansatz (5.4.16)) in zwei Teile separiert werden konnte: der eine enthielt nur die Variable q, der andere nur die Zeit t. Eine solche Separation ist immer dann möglich, wenn die *alte* Hamilton-Funktion H die Zeit nicht explizit enthält, $(\partial H/\partial t) = 0$, H also ein Integral der Bewegung ist. In solchen Fällen lautet die HJD (5.4.5)

$$H(\vec{q}, \frac{\partial S}{\partial q_1}, ..., \frac{\partial S}{\partial q_s}) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0, \tag{5.5.1}$$

und die gesamte Zeitabhängigkeit wird durch den zweiten Term beschrieben. Mit dem Ansatz

$$S(\vec{q}, \vec{P}, t) = W(\vec{q}|\vec{P}) - Et \tag{5.5.2}$$

folgt

$$H(\vec{q}, \frac{\partial W}{\partial q_1}, ..., \frac{\partial W}{\partial q_s}) = E \tag{5.5.3}$$

Die Konstante E ist in der Regel, nämlich bei skleronomen Zwangsbedingungen, die Gesamtenergie des Systems. Die Funktion $W(\vec{q}|\vec{P})$ wird *Hamiltonsche charakteristische Funktion* genannt.
Die Konstante E ist von den *neuen* Impulsen $P_j = \alpha_j$ abhängig:

$$E = E(\alpha_1, ..., \alpha_s) \tag{5.5.4}$$

Die durch die Funktion (5.5.2) erzeugte kanonische Transformation ist nach Gleichungen (5.3.21) – (5.3.22) gegeben durch

$$p_j = \frac{\partial S}{\partial q_j} = \frac{\partial W}{\partial q_j}, \tag{5.5.5}$$

$$Q_j = \frac{\partial S}{\partial P_j} = \frac{\partial S}{\partial \alpha_j} = \frac{\partial W}{\partial \alpha_j} - \frac{\partial E}{\partial \alpha_j} t. \tag{5.5.6}$$

5.6 Separation der Variablen

Ist das Hamilton-Jacobi-Verfahren überhaupt hilfreich? Man ersetzt schließlich $2s$ gewöhnliche (Hamiltonsche) Differentialgleichungen durch eine partielle Differentialgleichung. Letztere sind aber im allgemeinen schwieriger zu lösen. Die Hamilton-Jacobi-Methode ist nur dann ein mächtiges Verfahren, wenn sich die HJD separieren läßt.
Betrachten wir den Fall einer alten Hamilton-Funktion, die nicht explizit von der Zeit t abhängt, sodaß nach Gleichung (5.5.3)

$$H(\vec{q}, \frac{\partial W}{\partial q_1}, ..., \frac{\partial W}{\partial q_s}) = E \tag{5.6.1}$$

Wir nehmen an, daß q_1 und $(\partial W/\partial q_1)$ in H nur in der Form

$$f(q_1, \frac{\partial W}{\partial q_1})$$

erscheinen, wobei die Funktion f keine anderen q_j und $(\partial W/\partial q_j)$ mit $j > 1$ enthält. Dann reduziert sich die HJD (5.6.1) auf

$$H(q_2, ..., q_s, \frac{\partial W}{\partial q_2}, ..., \frac{\partial W}{\partial q_s}, f((q_1, \frac{\partial W}{\partial q_1})) = E \tag{5.6.2}$$

Es empfiehlt sich der Ansatz

$$W(\vec{q}|\vec{P}) = \bar{W}(q_2, ..., q_s|\vec{P}) + W_1(q_1|\vec{P}) \tag{5.6.3}$$

Einsetzen in Gleichung (5.6.2) liefert

$$H(q_2, ..., q_s, \frac{\partial \bar{W}}{\partial q_2}, ..., \frac{\partial \bar{W}}{\partial q_s}, f(q_1, \frac{\partial W_1}{\partial q_1})) = E \tag{5.6.4}$$

Nehmen wir an, wir hätten die Lösung für W bereits gefunden. Dann muß Gleichung (5.6.4) zur Identität werden, d.h. insbesondere für alle q_1 erfüllt sein. Eine Änderung von q_1 darf sich bezüglich H nicht bemerkbar machen. Da q_1 aber nur in die Funktion f eingeht, muß f selbst konstant sein, d.h.

$$f(q_1, \frac{dW_1}{dq_1}) = C_1 = const., \tag{5.6.5}$$

sodaß

$$H(q_2, ..., q_s, \frac{\partial \bar{W}}{\partial q_2}, ..., \frac{\partial \bar{W}}{\partial q_s}, C_1) = E \tag{5.6.6}$$

Da die neuen Impuse P_j nach Konstruktion sämtlich konstant sind, ist W_1 nur von q_1 abhängig und wir durften in (5.6.5) die partielle Ableitung $\frac{\partial W_1}{\partial q_1} = \frac{dW_1}{dq_1}$ durch die totale Ableitung ersetzen. Gleichung (5.6.5) ist damit eine *gewöhnliche* Differentialgleichung für W_1; Gleichung (5.6.6) nachwievor eine partielle Differentialgleichung für $\bar{W}$, aber mit einer um eins kleineren Zahl unabhängiger Variablen.
In manchen Fällen lassen sich so sukzessive alle Koordinaten abtrennen und die vollständige Lösung der HJD in Verallgemeinerung von Gleichung (5.6.3) ansetzen als

$$W = \sum_{j=1}^{s} W_j(q_j|\alpha_1, ..., \alpha_s) \tag{5.6.7}$$

Dadurch wird die HJD in s gewöhnliche Differentialgleichungen der Form

$$H_j(q_j, \frac{dW_j}{dq_j}, \alpha_1, ..., \alpha_s) = \alpha_j \tag{5.6.8}$$

zerlegt, d.h. die HJD ist in den Koordinaten q_j separabel.
Für den *Spezialfall*, daß nur eine Koordinate nicht zyklisch ist, ist eine Separation immer möglich: sei q_1 nicht-zyklisch, q_j für $j > 1$ zyklisch. Dann folgt nach (5.5.5)

$$p_j = \frac{\partial W}{\partial q_j} = \alpha_j = const., \quad j > 1 \tag{5.6.9}$$

Welcher Ansatz für W ist hier sinnvoll? Nach Konstruktion erzeugt W eine Transformation auf ausnahmslos zyklische neue Koordiaten. $q_2, ..., q_s$ sind aber bereits zyklisch. Für diese sollte W die identische Transformation (5.3.29),

$$F_2(\vec{q}, \vec{P}) = \sum_{j=2}^{s} q_j P_j,$$

sein. Mit $P_j = \alpha_j$ bietet sich als Ansatz für W an:

$$W = W_1(q_1) + \sum_{j=2}^{s} q_j P_j \tag{5.6.10}$$

Die HJD (5.6.1) wird damit zu einer gewöhnlichen Differentialgleichung 1. Ordnung für W_1

$$H(q_1, \frac{dW_1}{dq_1}, \alpha_2, \alpha_3, ..., \alpha_s) = E \tag{5.6.11}$$

Gleichung (5.6.11) läßt sich verallgemeinern, so daß man generell *jede* zyklische Koordinate q_i durch einen Ansatz der Form

$$W = \bar{W}(q_{j,j\neq i}|\vec{P}) + \alpha_i q_i \tag{5.6.12}$$

absepariert.
Für nicht-zyklische Koordinaten gibt es kein allgemeines Verfahren zur Separation.

5.6.1 Beispiel: Ebene Bewegung eines Teilchens im Zentralfeld

Zentralfeld bedeutet für das Potential $V(\vec{r}) = V(r)$. Generalisierte Koordinaten sind hier die Kugelkoordinaten, wobei die ebene Bewegung für $\theta = const.$ sorgt (vergl. Kap. 4.2). Es bleiben also

$$q_1 = r, \quad q_2 = \phi \tag{5.6.13}$$

Wir stellen zunächst die Hamilton-Funktion H auf. Aus der Lagrange-Funktion der Relativbewegung (4.2.2),

$$L = \frac{\mu}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) - V(r)$$

erhalten wir für die konjugierten Impulse

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = \mu\dot{r}, \quad \dot{r} = \frac{p_r}{\mu}$$

und

$$p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = \mu r^2 \dot{\phi}, \quad \dot{\phi} = \frac{p_\phi}{\mu r^2}$$

und erhalten nach Gleichung (5.1.8)

$$H = \sum_j p_j \dot{q}_j - L = p_r \dot{r} + p_\phi \dot{\phi} - L = \frac{p_r^2}{\mu} + \frac{p_\phi^2}{\mu r^2} - (\frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{p_\phi^2}{2\mu r^2} - V(r)) =$$

$$\frac{1}{2\mu}[p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2}] + V(r) \tag{5.6.14}$$

Die Koordinate ϕ ist zyklisch und damit ist $p_\phi = \alpha_\phi = l = const.$ (vergl. Gleichung (4.2.3)). Nach Gleichung (5.6.12) wählen wir für die charakteristische Funktion W den Ansatz

$$W = W_1(r) + \alpha_\phi \phi \tag{5.6.15}$$

Weil $(\partial H/\partial t) = 0$ und ferner die Zwangsbedingung (Bewegung in der Ebene) skleronom ist, lautet die zu lösende HJD (5.6.1)

$$\frac{1}{2\mu}[(\frac{\partial W}{\partial r})^2 + \frac{1}{r^2}(\frac{\partial W}{\partial \phi})^2] + V(r) = E,$$

wobei E die Gesamtenergie des Systems ist.
Mit dem Ansatz (5.6.15) erhalten wir

$$\frac{1}{2\mu}[(\frac{dW_1}{dr})^2 + \frac{\alpha_\phi^2}{r^2}] + V(r) = E,$$

sodaß

$$\frac{dW_1}{dr} = [2\mu(E - V(r)) - \frac{\alpha_\phi^2}{r^2}]^{1/2}$$

und

$$W = \alpha_\phi \phi + \int dr [2\mu(E - V(r)) - \frac{\alpha_\phi^2}{r^2}]^{1/2} \tag{5.6.16}$$

Gemäß Gleichung (5.4.11) sind die neuen Koordinaten konstant $Q_j = \beta_j$. Gleichzeitig gilt die Transformation (5.5.6), sodaß

$$Q_j = \beta_j = \frac{\partial W}{\partial \alpha_j} - \frac{\partial E}{\partial \alpha_j} t. \tag{5.6.17}$$

Identifizieren wir $E = \alpha_1$ mit der zweiten Konstante des Systems, so folgt für $j = 1$ aus Gleichung (5.6.17)

$$\beta_1 = \frac{\partial W}{\partial \alpha_1} - \frac{\partial E}{\partial \alpha_1} t = \frac{\partial W}{\partial E} - t$$

oder mit Gleichung (5.6.16)

$$t + \beta_1 = \int dr \frac{\mu}{[2\mu(E - V(r)) - \frac{\alpha_\phi^2}{r^2}]^{1/2}} \tag{5.6.18}$$

Die Umkehrung dieser Gleichung liefert $r = r(t, \alpha_1, \alpha_\phi, \beta_1)$.
Für $j = 2$ liefert Gleichung (5.6.17)

$$\beta_2 = \frac{\partial W}{\partial \alpha_\phi} = \phi - \alpha_\phi \int dr \frac{1}{r^2[2\mu(E - V(r)) - \frac{\alpha_\phi^2}{r^2}]^{1/2}}$$

Mit $\beta_2 = \phi_0$ und $x = 1/r$ folgt

$$\phi = \phi_0 - \int \frac{dx}{[\frac{2\mu}{l^2}(E - V(\frac{1}{x})) - x^2]^{1/2}} \tag{5.6.19}$$

Die Umkehrung dieser Gleichung liefert die Bahngleichung $r = r(\phi)$. Die Anfangsbedingungen legen die Konstanten β_1, ϕ_0, E und $l = \alpha_\phi$ fest.

5.6.2 Beispiel: Teilchen im Schwerefeld

Die Hamilton-Funktion $H = T + V = E$ ist

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \ mgz$$

Die Koordinaten x und y sind zyklisch, sodaß $p_x = \alpha_x = const.$, $p_y = \alpha_y = const.$. Nach Gleichung (5.6.12) wählen wir für die charakteristische Funktion W den Ansatz

$$W = W_1(z) + \alpha_x x + \alpha_y y$$

und erhalten für die HJD in diesem Fall

$$\frac{1}{2m}[(\frac{dW_1}{dz})^2 + \alpha_x^2 + \alpha_y^2] + mgz = E,$$

sodaß

$$W_1(z) = \int dz[2m(E - mgz) - \alpha_x^2 - \alpha_y^2]^{1/2} = -\frac{1}{3m^2 g}[2m(E - mgz) - \alpha_x^2 - \alpha_y^2]^{3/2}$$

und

$$W = -\frac{1}{3m^2 g}[2m(E - mgz) - \alpha_x^2 - \alpha_y^2]^{3/2} + \alpha_x x + \alpha_y y \tag{5.6.20}$$

Wir setzen wieder $E = \alpha_1$ und erhalten aus Gleichung (5.6.17) die drei Gleichungen

$$Q_1 = \beta_1 = \frac{\partial W}{\partial E} - t = -\frac{1}{mg}[2m(E - mgz) - \alpha_x^2 - \alpha_y^2]^{1/2} - t, \tag{5.6.21a}$$

$$Q_2 = \beta_2 = \frac{\partial W}{\partial \alpha_x} = x + \frac{\alpha_x}{mg}[2m(E - mgz) - \alpha_x^2 - \alpha_y^2]^{1/2} \tag{5.6.21b}$$

und

$$Q_3 = \beta_3 = \frac{\partial W}{\partial \alpha_y} = y + \frac{\alpha_y}{mg}[2m(E - mgz) - \alpha_x^2 - \alpha_y^2]^{1/2} \tag{5.6.21c}$$

Die erste Gleichung (5.6.21a) liefert über

$$2mE - 2m^2 gz - \alpha_x^2 - \alpha_y^2 = m^2 g^2 (t + \beta_1)^2$$

die Beziehung

$$z(t) = -\frac{1}{2} g(t + \beta_1)^2 + \frac{2mE - (\alpha_x^2 + \alpha_y^2)}{2m^2 g} \tag{5.6.22}$$

Setzen wir dies in die Gleichungen (5.6.21b) und (5.6.21c) ein, folgt

$$x(t) = \beta_2 + \frac{\alpha_x}{m}(t + \beta_1), \quad y(t) = \beta_3 + \frac{\alpha_y}{m}(t + \beta_1) \tag{5.6.23}$$

Als spezielle Anfangsbedingungen für $t = 0$ wählen wir $x(0) = y(0) = z(0)$ und $p_x(0) = p_0$, $p_y(0) = p_z(0) = 0$.
Gemäß Gleichung (5.5.5) folgt dann

$$p_x = \frac{\partial W}{\partial x} = \alpha_x = const. = p_0, \quad p_y = \frac{\partial W}{\partial y} = \alpha_y = const. = 0,$$

und

$$p_z = \frac{\partial W}{\partial z} = [2m(E - mgz) - \alpha_x^2 - \alpha_y^2]^{1/2} = [2m(E - mgz) - p_0^2]^{1/2}$$

Letztere Gleichung für $z = 0$ liefert

$$0 = [2mE - p_0^2]^{1/2}$$

oder $E = p_0^2/2m$. Damit folgt $\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = 0$ und die Bewegungsgleichungen (5.6.22) – (5.6.23) reduzieren sich auf

$$z(t) = -\frac{1}{2} g t^2, \quad x(t) = \frac{p_0}{m} t, \quad y(t) = 0 \tag{5.6.24}$$

5.7 Satz von Liouville

Der Satz von Liouville hat grundlegende Bedeutung für die statische Mechanik, d.h. der Beschreibung von Systemen mit großer Teilchenanzahl $\mathcal{O}(10^{23})$. Der Satz macht Ausagen über das Verhalten der Teilchendichte im Phasenraum als Funktion der Zeit t.

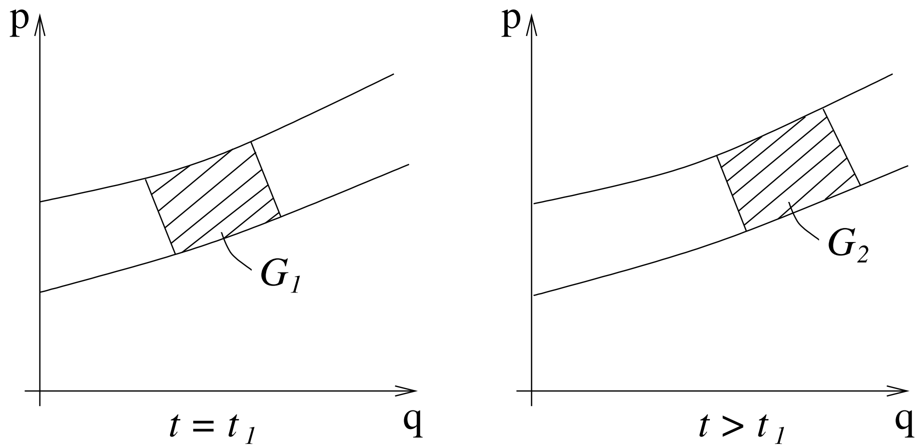

Abb. 5.4: Bewegung eines Volumens im Phasenraum.

Wie in Abb. 5.4 skizziert, betrachten wir die Lage von f Massenpunkten zur Zeit t_1 in einem Gebiet G_1 im $2f$-dimensionalen Phasenraum mit dem Volumen

$$\Delta V = \Delta q_1 \cdots \Delta q_f \Delta p_1 \cdots \Delta p_f$$

Bezeichnen wir mit ΔN die Anzahl der f Massenpunkte, dann gilt für die Teilchendichte

$$\rho = \frac{\Delta N}{\Delta V}$$

Mit Ablauf der Bewegung entsprechend den Hamiltonschen-Bewegungsgleichungen (5.1.10) – (5.1.11) für alle f Teilchen transformiert sich das Gebiet G_1 in das Gebiet G_2.
Satz von Liouville: Das Volumen irgendeines beliebigen Gebiets des Phasenraums bleibt erhalten, wenn sich die Punkte seiner Bewegung entsprechend den kanonischen Gleichungen bewegen.
Oder anders formuliert: Die Dichte der Punkte im Phasenraum ρ in der Umgebung eines mitbewegten Punktes ist konstant.
Beweis: Wir betrachten die Bewegung von Systempunkten durch ein Volumenelement des Phasenraums. Die Projektion des $2f$-dimensionalen Volumenelements auf die $q_k - p_k$-Ebene ist gleich der Fläche ABCD in Abb. 5.5.

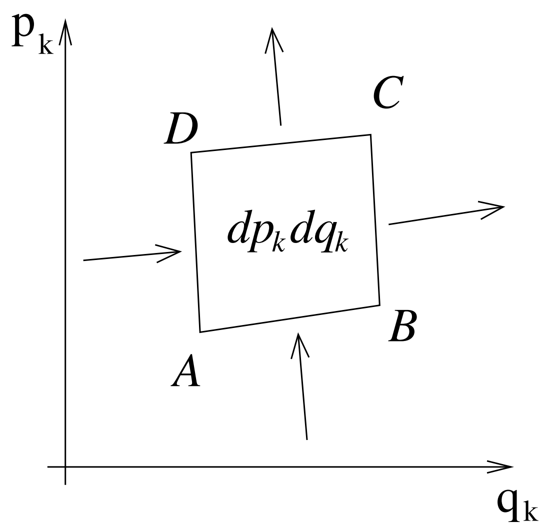

Abb. 5.5: Zum Beweis des Satzes von Liouville.

Der Fluß von Punkten durch die Seitenfläche, deren Projektion auf die $q_k - p_k$-Ebene gleich $\overline{AD}$ ist, ist durch

$$\rho \dot{q}_k dp_k dV_k,$$

weil sich in Richtung q_k alle Punkte mit der Geschwindigkeit $\dot{q}_k$ bewegen und $dp_k dV_k$ die Größe der Seitenfläche ist. Dabei ist

$$dV_k = \prod_{\alpha=1,\alpha\neq k}^{f} dq_\alpha dp_\alpha$$

das $(2f-2)$-dimensionale Restvolumenelement.
Für den Fluß der bei $\overline{BC}$ austretenden Punkte ergibt die Taylor-Entwicklung

$$[\rho \dot{q}_k + \frac{\partial}{\partial q_k}(\rho \dot{q}_k) dq_k] dp_k dV_k,$$

Analog berechen wir den Fluß in p_k-Richtung:

$$\text{Eintritt durch } \overline{AB} : \rho \dot{p}_k dq_k dV_k$$

$$\text{Austritt durch } \overline{CD} : [\rho \dot{p}_k + \frac{\partial}{\partial p_k}(\rho \dot{p}_k) dp_k] dq_k dV_k$$

Aus der Differenz der ein- und austretenden Flüsse berechnen wir die Anzahl der in dem Volumenelement vorhandenen Punkte zu

$$-dV[\frac{\partial}{\partial q_k}(\rho \dot{q}_k) + \frac{\partial}{\partial p_k}(\rho \dot{p}_k)]$$

Durch Summation über alle $k = 1, ..., f$ erhält man die Anzahl $dV \frac{\partial \rho}{\partial t}$ der steckengebliebenen Punkte, also

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\sum_{k=1}^{f}[\frac{\partial}{\partial q_k}(\rho \dot{q}_k) + \frac{\partial}{\partial p_k}(\rho \dot{p}_k)] = -\sum_{k=1}^{f}[\frac{\partial \rho}{\partial q_k}\dot{q}_k + \rho\frac{\partial \dot{q}_k}{\partial q_k} + \frac{\partial \rho}{\partial p_k}\dot{p}_k + \rho\frac{\partial \dot{p}_k}{\partial p_k}] \tag{5.7.1}$$

Mit den Hamiltonschen-Bewegungsgleichungen (5.1.10) – (5.1.11),

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}$$

folgt

$$\frac{\partial \dot{q}_k}{\partial q_k} = \frac{\partial^2 H}{\partial q_k \partial p_k}, \quad \frac{\partial \dot{p}_k}{\partial p_k} = -\frac{\partial^2 H}{\partial p_k \partial q_k},$$

sodaß

$$\frac{\partial \dot{q}_k}{\partial q_k} + \frac{\partial \dot{p}_k}{\partial p_k} = 0$$

Gleichung (5.7.1) reduziert sich dann auf

$$\sum_{k=1}^{f}[\frac{\partial \rho}{\partial q_k}\dot{q}_k + \frac{\partial \rho}{\partial p_k}\dot{p}_k] + \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{d\rho}{dt} = 0 \tag{5.7.2}$$

oder $\rho = const.$ Q.E.D.

5.8 Integralinvarianten von Poincare

Kanonische Transformationen sind so definiert, daß die Form der kanonischen Bewegungsgleichungen bei der Transformation erhalten bleibt. Gibt es andere Ausdrücke, die gegenüber kanonischen Transformationen invariant sind? JA: die von Poincare gefundenen Integralinvarianten haben diese Eigenschaft.
Wir betrachten den $2n$-dimensionalen Phasenraum $q_1, ..., q_n, p_1, ..., p_n$.
Satz von Poincare: Das Integral

$$J_1 = \int_S \int \sum_i dq_i dp_i = \int_S \int \sum_k dQ_k dP_k \tag{5.8.1}$$

ist gegenüber kanonischen Transformationen invariant, wobei S anzeigt, daß das Integral über eine beliebige 2-dimensionale Fläche im Phasenraum zu erstrecken ist.
Beweis: Zwei Parameter u und v kennzeichnen die Lage eines Punktes auf der 2-dimensionalen Fläche S vollständig. Dort sei $q_i = q_i(u, v)$, $p_i = p_i(u, v)$. Dann kann ein Flächenelement $dq_i dp_i$ mithilfe der Jacobi-Determinante

$$\frac{\partial(q_i, p_i)}{\partial(u, v)} \equiv \begin{vmatrix} \frac{\partial q_i}{\partial u} & \frac{\partial p_i}{\partial u} \\ \frac{\partial q_i}{\partial v} & \frac{\partial p_i}{\partial v} \end{vmatrix} \tag{5.8.2}$$

auf ein Flächenelement $dudv$ transformiert werden:

$$dq_i dp_i = \frac{\partial(q_i,p_i)}{\partial(u,v)} dudv$$

Somit ist die Behauptung (5.8.1) äquivalent zu

$$\int_s \int \sum_i \frac{\partial(q_i,p_i)}{\partial(u,v)} dudv = \int_s \int \sum_k \frac{\partial(Q_k,P_k)}{\partial(u,v)} dudv$$

Da das Integrationsgebiet s beliebig ist, können die Integrale nur dann gleich sein, wenn die Integranden identisch sind

$$\sum_i \frac{\partial(q_i,p_i)}{\partial(u,v)} dudv = \sum_k \frac{\partial(Q_k,P_k)}{\partial(u,v)} dudv$$

Wir fassen die kanonische Transformation von den (q,p) zu den (Q,P) so auf, als hätten wir sie aus einer Erzeugenden vom Typ $F_2(q,P,t)$ erhalten. Mit Gleichung (5.3.21), $p_i = \partial F_2/\partial q_i$

$$\frac{\partial p_i}{\partial u} = \frac{\partial}{\partial u}\left(\frac{\partial F_2(q,P,t)}{\partial q_i}\right)$$

Die Größe in der Klammer ist wegen ihrer Argumente q und P eine Funktion von u und wir erhalten

$$\frac{\partial p_i}{\partial u} = \sum_k \frac{\partial^2 F_2(q,P,t)}{\partial q_i \partial P_k}\frac{\partial P_k}{\partial u} + \sum_k \frac{\partial^2 F_2(q,P,t)}{\partial q_i \partial q_k}\frac{\partial q_k}{\partial u}$$

Ebenso gilt

$$\frac{\partial p_i}{\partial v} = \sum_k \frac{\partial^2 F_2(q,P,t)}{\partial q_i \partial P_k}\frac{\partial P_k}{\partial v} + \sum_k \frac{\partial^2 F_2(q,P,t)}{\partial q_i \partial q_k}\frac{\partial q_k}{\partial v}$$

Damit erhalten wir mit (5.8.2) mit den Rechenregeln für Determinanten (2 Summanden, Faktoren in einer Spalte herausziehen)

$$\sum_i \frac{\partial(q_i,p_i)}{\partial(u,v)} = \sum_i \begin{vmatrix} \frac{\partial q_i}{\partial u} & \sum_k \frac{\partial^2 F_2(q,P,t)}{\partial q_i \partial P_k}\frac{\partial P_k}{\partial u} + \sum_k \frac{\partial^2 F_2(q,P,t)}{\partial q_i \partial q_k}\frac{\partial q_k}{\partial u} \\ \frac{\partial q_i}{\partial v} & \sum_k \frac{\partial^2 F_2(q,P,t)}{\partial q_i \partial P_k}\frac{\partial P_k}{\partial v} + \sum_k \frac{\partial^2 F_2(q,P,t)}{\partial q_i \partial q_k}\frac{\partial q_k}{\partial v} \end{vmatrix}$$

$$= \sum_i \sum_k \frac{\partial^2 F_2(q,P,t)}{\partial q_i \partial P_k} \begin{vmatrix} \frac{\partial q_i}{\partial u} & \frac{\partial P_k}{\partial u} \\ \frac{\partial q_i}{\partial v} & \frac{\partial P_k}{\partial v} \end{vmatrix} + \sum_i \sum_k \frac{\partial^2 F_2(q,P,t)}{\partial q_i \partial q_k} \begin{vmatrix} \frac{\partial q_i}{\partial u} & \frac{\partial q_k}{\partial u} \\ \frac{\partial q_i}{\partial v} & \frac{\partial q_k}{\partial v} \end{vmatrix}$$

Die Terme der zweiten Reihe sind antisymmetrisch bezüglich der Vertauschung der Indizes i und k, da dabei die zwei Spalten der Determinante vertauscht werden. Der Wert der Summe darf aber nicht durch Vertauschen der Indizes beeinflußt werden; demnach muß die zweite Reihe identisch verschwinden. Wir dürfen an ihre Stelle eine ähnlich konstruierte Reihe setzen, deren Summe ebenfalls Null ist:

$$\sum_i \frac{\partial(q_i,p_i)}{\partial(u,v)} = \sum_i \sum_k \frac{\partial^2 F_2(q,P,t)}{\partial q_i \partial P_k} \begin{vmatrix} \frac{\partial q_i}{\partial u} & \frac{\partial P_k}{\partial u} \\ \frac{\partial q_i}{\partial v} & \frac{\partial P_k}{\partial v} \end{vmatrix} + \sum_i \sum_k \frac{\partial^2 F_2(q,P,t)}{\partial P_i \partial P_k} \begin{vmatrix} \frac{\partial P_i}{\partial u} & \frac{\partial P_k}{\partial u} \\ \frac{\partial P_i}{\partial v} & \frac{\partial P_k}{\partial v} \end{vmatrix}$$

Die Operation der Entwicklung der Determinantensumme kann nun umgekehrt werden, allerdings soll in der Determinante jetzt die Summe über i und nicht über k gebildet werden. Z.B. in der 1. Spalte der Determinante tritt die Summe auf:

$$\sum_i \frac{\partial^2 F_2(q,P,t)}{\partial q_i \partial P_k} \frac{\partial q_i}{\partial u} + \sum_i \frac{\partial^2 F_2(q,P,t)}{\partial P_i \partial P_k} \frac{\partial P_i}{\partial u} = \frac{\partial}{\partial u}\left(\frac{\partial F_2}{\partial P_k}\right) = \frac{\partial Q_k}{\partial u},$$

wobei wir im letzten Schritt Gleichung (5.3.22) benutzt haben. Damit reduziert sich die Determinantensumme auf

$$\sum_i \frac{\partial(q_i,p_i)}{\partial(u,v)} = \sum_k \begin{vmatrix} \frac{\partial Q_k}{\partial u} & \frac{\partial P_k}{\partial u} \\ \frac{\partial Q_k}{\partial v} & \frac{\partial P_k}{\partial v} \end{vmatrix} = \sum_k \frac{\partial(Q_k,P_k)}{\partial(u,v)}$$

Q.E.D.

Auf ähnliche Weise – der Beweis ist jedoch komplizierter – kann man die Invarianz von

$$J_2 = \int\int_S \int\int \sum_{i,k} dq_i dp_i dq_k dp_k$$

bei kanonischer Transformation zeigen, wobei S eine beliebige vierdimendionale Fläche des $2n$-dimensionalen Phasenraums ist. Diese Kette von Integralinvarianten kann schließlich erweitert werden auf die Invarianz von

$$J_n = \int \cdots \int dq_1 .....dq_n dp_i .....dp_n,$$

wobei das Integral über ein beliebiges Gebiet des Phasenraums ausgedehnt werden kann. Die Invarianz von J_n ist der Feststellung gleichwertig, daß das Volumen im Phasenraum gegenüber kanonischen Transformationen invariant ist. Daraus folgt, daß das Volumen im Phasenraum zeitlich konstant ist, da wir die zeitliche Entwicklung durch infinitesimale kanonische Transformationen darstellen können (für mehr Details siehe Goldstein, Kap. 8.6).