Kapitel 9

Hamilton'sche Mechanik

In der LAGRANGE-Mechanik wird der Zustand eines Systems durch die f verallgemeinerten Koordinaten $q = (q^1, \ldots, q^f)$ und die f verallgemeinerten Geschwindigkeiten $\dot{q} = (\dot{q}^1, \ldots, \dot{q}^f)$ beschrieben. Hier ist $f = 3N - s$ die Dimension des Konfigurationsraumes für N Teilchen unter s (holonomen) Zwangsbedingungen; $3N$ ist die Zahl der kartesischen Koordinaten. Durch den Übergang von den kartesischen zu den verallgemeinerten Koordinaten haben wir die holonomen Zwangsbedingungen eliminiert.

In der HAMILTON'schen Mechanik werden die verallgemeinerten Geschwindigkeiten durch die verallgemeinerten Impulse ersetzt

$$(t, q, \dot{q}) \longrightarrow (t, q, p), \qquad p = (p_1, \ldots, p_f). \tag{9.1}$$

Die (q, p) sind die Koordinaten des *Phasenraumes* Γ. Der Übergang (9.1) wird durch eine LEGENDRE-Transformation geleistet. Die Formulierung der Mechanik im Phasenraum wurde von Sir WILLIAM ROWAN HAMILTON in den Dreißiger Jahren des 19. Jahrhunderts entwickelt. Sie beschränkt sich auf die reibungsfreie Bewegung, also auf Systeme, die durch eine Lagrangefunktion beschrieben werden[1]. Insofern behandelt sie keine neue Physik, die wir nicht auch schon mit Hilfe des LAGRANGE-Formalismus beschreiben könnten. Daß wir uns noch heute mit der HAMILTON'schen Mechanik befassen hat folgende Gründe:

- Sie gibt eine Formulierung der Grundgesetze der Mechanik, die ihre mathematischen Eigenschaften, insbesondere ihre *symplektische Struktur*, besonders deutlich macht. Sie ermöglicht eine qualitative, geometrische Beschreibung der Bewegung im Phasenraum und ist für die Chaostheorie bedeutsam.
- Sie bildet den gängigsten Ausgangspunkt[2] für die Erweiterungen der klassischen Mechanik zur statistischen Mechanik oder/und zur Quantenmechanik und ist daher für ein Verständnis dieser Theorien von grundsätzlicher Bedeutung.

[1]Für dissipative Systeme gibt es natürlich auch eine LAGRANGEsche Beschreibung. Die Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^j} - \frac{\partial L}{\partial q^j} = Q_j^{(R)}$$

enthalten aber neben der LAGRANGE-Funktion noch Reibungskräfte $Q_j^{(R)}$.

[2]Man kann auch den LAGRANGE-Formalismus als Ausgangspunkt wählen.

- Die im Rahmen dieser Theorie gültigen Bewegungsgleichungen für die verallgemeinerten Koordinaten und Impulse sind explizite Differentialgleichungen von erster Ordnung in der Zeit und daher für numerische Rechnungen besser geeignet als die impliziten LAGRANGE-Gleichungen zweiter Ordnung.
- In der HAMILTON'schen Mechanik lassen sich die Bedingungen für die Integrierbarkeit eines mechanischen Systems und für die Möglichkeit chaotischen Verhaltens am besten diskutieren.

9.1 Hamiltonsche Bewegungsgleichungen

Wir beschränken uns auf Systeme, die durch eine LAGRANGE-Funktion $L(t, q, \dot{q})$ beschrieben werden können. Die Koordinaten $q^1, \ldots, q^f$ sind dabei f unabhängige verallgemeinerte Koordinaten für f Freiheitsgrade. In den Gleichungen (7.26) und (7.70) haben wir bereits die *kanonischen Impulse*

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^j} \tag{9.2}$$

eingeführt. Die HAMILTON'sche Theorie benutzt nun nicht mehr die Variablen q und $\dot{q}$, die in der LAGRANGE'schen Formulierung wesentlich waren, sondern die unabhängigen Variablen q und p. Man löst dazu die Gleichungen (9.2) nach den Geschwindigkeiten $\dot{q}$ auf,

$$\dot{q}^j = \dot{q}^j(t, q, p), \tag{9.3}$$

was nach dem Theorem über implizite Funktionen (lokal) möglich ist, wenn

$$\det\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^i \partial \dot{q}^j}\right) \neq 0$$

ist. Wenn man nun in allen Funktionen die verallgemeinerten Geschwindigkeiten durch diese Ausdrücke ersetzt, erhält man Funktionen der Koordinaten und der Impulse. Die zentrale Rolle spielt dabei nicht mehr die LAGRANGE-Funktion $L(t, q, \dot{q})$ sondern die HAMILTON-Funktion

$$H(t, q, p) = \sum_j p_j \dot{q}^j(t, q, p) - L\big(t, q, \dot{q}(t, q, p)\big) = p\dot{q} - L. \tag{9.4}$$

Diese Funktion haben wir schon in (7.33), dort allerdings als Funktion der Orte und Geschwindigkeiten, eingeführt. Wir haben gezeigt, daß für kinetische Energien, die homogen quadratisch in den $\dot{q}^j$ sind, H die Gesamtenergie des mechanischen Systems ist. Aus der Homogenität der Zeit folgte die Zeitunabhängigkeit der Funktion H. Diese HAMILTON-Funktion hat als natürliche Argumente die Zeit, die f Koordinaten und die f Impulse.

Mit Hilfe der LAGRANGE-Gleichungen zweiter Art lassen sich nun die HAMILTON'schen Bewegungsgleichungen für die Funktionen $q(t)$ und $p(t)$ ableiten. Dazu differenzieren wir zunächst die Hamiltonfunktion (9.4) partiell nach den Koordinaten, wobei wir die *Impulse festhalten* (und nicht die Geschwindigkeiten). Wir finden

$$\frac{\partial H}{\partial q^i} = \sum_j p_j \frac{\partial \dot{q}^j}{\partial q^i} - \frac{\partial L}{\partial q^i} - \sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^j}\frac{\partial \dot{q}^j}{\partial q^i} \overset{(9.2)}{=} -\frac{\partial L}{\partial q^i} = -\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} = -\frac{dp_i}{dt}. \tag{9.5}$$

Im zweitletzten Schritt benutzten wir die LAGRANGE-Gleichungen zweiter Art. Des weiteren folgt

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}^i + \sum_j p_j \frac{\partial \dot{q}^j}{\partial p_i} - \sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^j}\frac{\partial \dot{q}^j}{\partial p_i} \overset{(9.2)}{=} \frac{dq^i}{dt}.$$

Zusammenfassend erhalten wir die folgenden HAMILTON'*schen Bewegungsgleichungen*

$$\dot{q}^i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{und} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q^i}. \tag{9.6}$$

Analog zeigt man unter Zuhilfenahme der Definition der kanonischen Impulse, daß

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}. \tag{9.7}$$

Diese Gleichung zeigt, daß für autonome Systeme die HAMILTON-Funktion nicht explizit von der Zeit abhängt. In diesem Fall ist $H = H(q, p)$. Wir haben bereits früher gesehen, daß H mit der Energie des mechanischen Systems identifiziert werden kann. Die HAMILTON-Funktion ist deshalb die Energie, ausgedrückt in verallgemeinerten Koordinaten und Impulsen.

Die HAMILTON'schen Bewegungsgleichungen (9.6) sind ein Satz von $2f$ gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung in der Zeit für die $2f$ Variablen q und p. Sie sind äquivalent zu den f LAGRANGE-Gleichungen zweiter Art, die Differentialgleichungen zweiter Ordnung in der Zeit für die f Koordinaten q^j sind. Die Lösungen der HAMILTON'schen Bewegungsgleichungen sind eindeutig bestimmt, wenn wir zu einer festen Zeit die Orte und die Impulse des Systems angeben können.

Die q^i und p_i sind (lokale) Koordinaten des $2f$-dimensionalen *Phasenraums* Γ, der oft auch Zustandsraum genannt wird. Die Lage des Ausgangspunktes in Γ zur Zeit t_0 determiniert, zusammen mit der HAMILTON-Funktion, vollständig die Entwicklung des Systems. Im Gegensatz hierzu braucht man zur Charakterisierung des Systems im f-dimensionalen *Konfigurationsraum* des LAGRANGE-Formalismus sowohl den verallgemeinerten Ort q als auch die verallgemeinerte Geschwindigkeit $\dot{q}$. Die Variablen q^i und p_i heißen zueinander konjugierte Variable oder kanonisch konjugierte Variable.

In (9.5) haben wir auch gezeigt, daß $\partial H/\partial q^i = -\partial L/\partial q^i$ gilt. Ist etwa q^f eine zyklische Koordinate, so hängt die HAMILTON-Funktion nicht von dieser Koordinate ab. Der konjugierte Impuls ist dann eine Konstante der Bewegung (ein Integral der Bewegung), p_f =const= α_f, und H hat die Form

$$H = H(t, q^1, \ldots, q^{f-1}, p_1, \ldots, p_{f-1}, \alpha_f). \tag{9.8}$$

Man hat es also mit einem Problem mit $f - 1$ Koordinaten zu tun, das man weiter behandeln kann, ohne die Koordinate q^f zu berücksichtigen. Bei den LAGRANGEschen Gleichungen ist diese einfache Art der Reduzierung des Problems nicht möglich. Sind *alle Koordinaten zyklisch*, d.h. ist H eine Funktion nur der Impulse und der Zeit,

$$H = H(t, p_1, \ldots, p_f), \tag{9.9}$$

so lassen sich die kanonischen Gleichungen sofort vollständig integrieren und ihre Lösungen können unmittelbar angegeben werden. Bei zyklischen Koordinaten folgt nämlich

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q^i} = 0 \quad \text{und} \quad \dot{q}^i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \omega^i(t)$$

wobei die $\omega^i(t)$ wegen p_i =const bekannte, nur von t abhängige Funktionen sind:

$$p_i = \alpha_i (= \text{const}) \quad \text{und} \quad q^i = \int \omega^i(t) dt + \beta^i, \quad i = 1, \ldots, f. \tag{9.10}$$

Die (α_i, β^i) sind die notwendigen $2f$ Integrationskonstanten. Sie werden durch die Anfangsbedingung festgelegt.

9.1.1 Beispiele

Hier bestimmen wir die Hamilton-Funktionen und kanonischen Bewegungsgleichungen (9.6) für einige einfache mechanische Systeme.

Eindimensionaler harmonischer Oszillator: Die Lagrange-Funktion ist

$$L = \frac{m}{2}\left(\dot{x}^2 - \omega^2 x^2\right),$$

so daß der kanonische Impuls und die Hamilton-Funktion folgende einfache Form haben

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}, \qquad H = p\dot{x} - L = \frac{m}{2}\left(\dot{x}^2 + \omega^2 x^2\right) = \frac{1}{2m}\left(p^2 + (m\omega)^2 x^2\right). \tag{9.11}$$

Wie erwartet ist H die Energie des Oszillators. Die kanonischen Bewegungsgleichungen lauten

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \quad \text{und} \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -m\omega^2 x, \tag{9.12}$$

oder zusammen

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0. \tag{9.13}$$

Ein geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld: Aus der Lagrange-Funktion

$$L = \frac{m}{2}\dot{\mathbf{r}}^2 - q\varphi(t, \mathbf{r}) + q\mathbf{A}(t, \mathbf{r}) \cdot \dot{\mathbf{r}}, \tag{9.14}$$

mit einem skalaren Potential φ und einem Vektorpotential $\mathbf{A}$ liest man den zu $\mathbf{r}$ kanonisch konjugierten Impuls ab,

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = m\dot{\mathbf{r}} + q\mathbf{A}(t, \mathbf{r}). \tag{9.15}$$

Wir lösen nach der Geschwindigkeit auf, $m\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{p} - q\mathbf{A}$, und bestimmen die Hamilton-Funktion:

$$
\begin{aligned}
H &= \mathbf{p}\cdot\dot{\mathbf{r}} - L = \frac{1}{m}\,\mathbf{p}\cdot(\mathbf{p}-q\mathbf{A}) - \frac{1}{2m}\big(\mathbf{p}-q\mathbf{A}\big)^2 + q\varphi - \frac{q}{m}\mathbf{A}\cdot(\mathbf{p}-q\mathbf{A}) \\
&= \frac{1}{2m}\big(\mathbf{p}-q\mathbf{A}\big)^2 + q\varphi.
\end{aligned} \tag{9.16}
$$

Damit erhalten wir die kanonischen Bewegungsgleichungen

$$
\begin{aligned}
\dot{x}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{1}{m}\big(p_i - qA_i\big) \\
\dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial x_i} = -q\frac{\partial \varphi}{\partial x_i} + \frac{q}{m}\big(\mathbf{p}-q\mathbf{A}\big)\cdot\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x_i}.
\end{aligned} \tag{9.17}
$$

Daraus folgen die LORENTZ'schen Bewegungsgleichungen für ein geladenes Teichen im elektromagnetischen Feld (Übung).

Allgemeines Potentialproblem: Für eine LAGRANGE-Funktion der allgemeinen Form (wir benutzen wieder die EINSTEIN'sche Summenkonvention)

$$
L = \frac{1}{2}\, g_{ij}(q)\dot{q}^i\dot{q}^j - V(t,q) \tag{9.18}
$$

sind die kanonischen Impulse

$$
p_i = g_{ij}(q)\dot{q}^j \quad \text{und damit ist} \quad \dot{q}^i = g^{ij}(q)p_j, \tag{9.19}
$$

wobei $(g^{ij})(q)$ die zu $(g_{ij})(q)$ inverse Matrix ist,

$$
g_{ik}(q)g^{kj}(q) = \delta_i^{\,j}.
$$

Damit lautet die HAMILTON-Funktion

$$
H = p_i\dot{q}^i - \frac{1}{2}g_{ij}(q)\dot{q}^i\dot{q}^j + V(t,q) = \frac{1}{2}g^{ij}(q)\,p_ip_j + V(t,q). \tag{9.20}
$$

Die HAMILTON-Gleichungen sind

$$
\dot{q}^i = g^{ij}(q)\,p_j \quad \text{und} \quad \dot{p}_i = -\frac{1}{2}\frac{\partial g^{jk}(q)}{\partial q^i}p_jp_k - \frac{\partial V(t,q)}{\partial q^i}. \tag{9.21}
$$

Für kartesische Koordinaten sind die Koeffizienten g_{ij} der Metrik ortsunabhängig, und wir finden wieder die bekannten NEWTON'schen Bewegungsgleichungen.

9.1.2 Die Legendre-Transformation

Der Übergang

$$
q, \dot{q}, L \longrightarrow q, p, H
$$

entspricht einer mathematischen Operation, die man LEGENDRE-*Transformation* nennt. Da diese Transformation in mehreren Gebieten der Physik (Mechanik, Thermodynamik, Quantenfeldtheorie) wichtig ist, wollen wir sie hier etwas näher untersuchen.

Wir betrachten zuerst den Fall einer Variablen, denn dieser läßt sich graphisch leicht darstellen.

Definition: *Es sei $L \in C^2$ eine reelle Funktion auf einem offenen Intervall I mit $L'' > 0$. Die* LEGENDRE-*Transformierte $\mathcal{L}L : J \to \mathbb{R}$ von L mit $J := L'(I) \subset \mathbb{R}$, ist gegeben durch*

$$(\mathcal{L}L)(p) = \max_{v \in I} \big\{ vp - L(v) \big\}. \tag{9.22}$$

Der zu maximierende Ausdruck in den geschweiften Klammern ist extremal für diejenigen v, welche die Gleichung

$$L'(v) = p \Longrightarrow v = v(p), \tag{9.23}$$

erfüllen. Nach Definition des Intervalls J existiert für jedes $p \in J$ mindestens eine Lösung $v(p)$ von (9.23). Die LEGENDRE-Transformation ist damit wohldefiniert. Da die zweite Ableitung des Ausdrucks gleich $-L''(v) < 0$ ist, handelt es sich um beim Extremum um ein Maximum, und dieses ist dann eindeutig.

Zum Beispiel, für $I = \mathbb{R}$ und $L(v) = e^v$ ist $J = (0, \infty)$ und

$$(\mathcal{L}L)(p) = \max_v (pv - e^v) \overset{v = \log p}{=} p(\log p - 1).$$

Wie wir in Abbildung (9.1) sehen, hat die LEGENDRE-Transformierte von L eine *anschauliche Bedeutung:* Sie ist der minimale Ordinaten-Abstand zwischen dem Graphen von L und dem Graphen der Geraden pv durch den Ursprung. Das Maximum wird für den Wert $v = v(p)$ angenommen, der

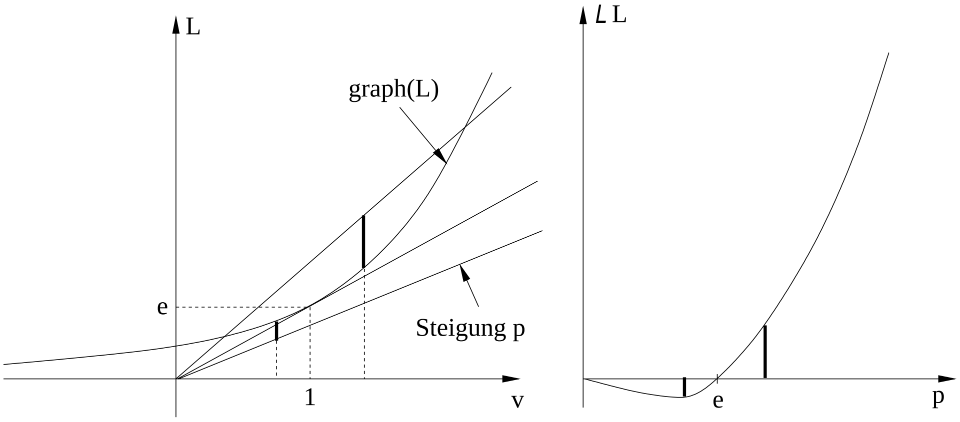

Abbildung 9.1: *Legendretransformierte der Exponentialfunktion*

durch $p = L'(v)$ gegeben ist.

Wegen

$$(\mathcal{L}L)(p) \quad = \quad p \cdot v(p) - L\big(v(p)\big) \tag{9.24}$$

ist die Ableitung der LEGENDRE-Transformierten von L gleich

$$\big(\mathcal{L}L\big)'(p) \quad = \quad v(p) + pv'(p) - L'\big(v(p)\big)v'(p) \overset{(9.23)}{=} v(p). \tag{9.25}$$

Aus $L'' > 0$ folgt die Monotonie von L' und mit (9.23) wächst v monoton mit p. Also wächst $(\mathcal{L}L)'(p) = v(p)$ monoton mit p und damit ist $(\mathcal{L}L)'' > 0$, d.h. die LEGENDRE-Transformation bildet konvexe Funktionen in konvexe Funktionen ab. Da $\mathcal{L}L$ außerdem auf einem offenen Intervall, nämlich $J := L'(I) \subset \mathbb{R}$, definiert ist, können wir auf $\mathcal{L}L$ wieder die LEGENDRE-Transformation anwenden.

Satz: *Die* LEGENDRE-*Transformierte ist involutiv: ist* $\mathcal{L}L$ LEGENDRE-*Transformierte von* $L : I \to \mathbb{R}$, *so ist auch* L LEGENDRE-*Transformierte von* $\mathcal{L}L$, *d.h.* $\mathcal{L} \circ \mathcal{L} = \mathbb{1}$.

Beweis: Da nach (9.25) $(\mathcal{L}L)'(p) = v(p)$ ist, ist $(\mathcal{L}L)'(J) = I$. Die LEGENDRE-Transformierte von $\mathcal{L}L$ ist gemäß Definition

$$(\mathcal{L}^2 L)(u) = \max_p \big\{up - (\mathcal{L}L)(p)\big\} = \max_p \big\{up - pv(p) + L\big(v(p)\big)\big\} \quad \text{mit} \quad v(p) \overset{(9.23)}{=} (L')^{-1}(p).$$

Das maximierende p erfüllt die Gleichung

$$0 = u - v(p) - pv'(p) + \underbrace{L'\big(v(p)\big)}_{p}\, v'(p) = u - v(p).$$

Damit wird das Maximum bei $u = v(p)$, also $p = L'(u)$ angenommen, so daß

$$\max_{p \in J} \big\{up - (\mathcal{L}L)(p)\big\} = uL'(u) - L'(u)u + L(u) = L(u)$$

gilt, was zu beweisen war.

Beispiele für derartige LEGENDRE-Transformationen bezüglich einer Variablen sind aus der Thermodynamik wohlbekannt: Aus der inneren Energie $U(S,V)$ mit den natürlichen Variablen Entropie S und Volumen V ergibt sich durch LEGENDRE-Transformation bezüglich der ersten Variablen die freie Energie $F(T,V) = U - TS$ mit den natürlichen Variablen T und V. In der Thermodynamik sind die Potentiale nicht immer strikt konvex oder/und zweimal stetig differenzierbar. Aber auch für solche Potentiale kann die LEGENDRE-Transformation gemäß (9.22) definiert werden. Man zeigt zum Beispiel, daß $\mathcal{L}^2 L$ die konvexe Einhüllende der Funktion L ist.

Im Fall *mehrerer Variablen* beginnen wir mit einer auf ganz $\mathbb{R}^f$ definierten Funktion $L \in C^2(\mathbb{R}^f, \mathbb{R})$, wobei die HESSE-Matrix

$$\Big(\frac{\partial^2 L}{\partial v^i \partial v^j}\Big) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 L}{\partial v^1 \partial v^1} & \cdots & \frac{\partial^2 L}{\partial v^1 \partial v^f} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 L}{\partial v^f \partial v^1} & \cdots & \frac{\partial^2 L}{\partial v^f \partial v^f} \end{pmatrix}$$

positiv ist. Dann können wir $p_i = \partial L / \partial v^i$ (lokal) nach den v^i auflösen.

Definition: *Sei* $J := \nabla L(\mathbb{R}^f) \subset \mathbb{R}^f$. *Die* LEGENDRE-*Transformation* $\mathcal{L}L : J \to \mathbb{R}$ *ist durch*

$$(\mathcal{L}L)(p) = \max_{v \in \mathbb{R}^f} \big\{p_i v^i - L(v)\big\}, \qquad p \in J \tag{9.26}$$

gegeben.

Beispiel: für eine symmetrische positive Matrix A sei L die durch

$$L(v) = \frac{1}{2} v^i A_{ij} v^j$$

definierte quadratische Form. Dann ist

$$(\mathcal{L}L)(p) = \max_v \left\{p_i v^i - \frac{1}{2} v^i A_{ij} v^j\right\} \overset{p=Av}{=} \frac{1}{2} p_i (A^{-1})_{ij} p_j .$$

Eine quadratische Form geht unter der LEGENDRE-Transformation wieder in eine quadratische Form über. Eine Anwendung findet diese Formel in der Umrechnung der kinetischen Energie von Geschwindigkeits- auf Impulskoordinaten.

Nun wenden wir die LEGENDRE-Transformation an, um die LAGRANGE-Funktion in die HAMILTON-Funktion umzuwandeln und umgekehrt. Es sei also $L \in C^\infty(\mathbb{R}, R^f_q \times \mathbb{R}^f_{\dot{q}})$ und

$$\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^i \partial \dot{q}^j}\right) > 0. \tag{9.27}$$

Dann ist die die HAMILTON-Funktion

$$H(q,p) = \max_{\dot{q}} \left\{p_i \dot{q}^i - L(t,q,\dot{q})\right\} = p_i \dot{q}^i(t,q,p) - L\big((t,q,\dot{q}(t,q,p)\big), \tag{9.28}$$

wobei die maximierende Geschwindigkeiten $\dot{q}^i(t,q,p)$ durch Auflösung der Gleichungen für die kanonischen Impulse,

$$p_i = p_i(t,q,\dot{q}) = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}, \tag{9.29}$$

zu berechnen sind. Die HAMILTON-Funktion H ist ebenfalls C^∞. Daß H die gleiche Differenzierbarkeitsstufe wie L hat, folgt aus der Tatsache, daß die Abbildung

$$\Phi : \mathbb{R}^{2f} \longrightarrow \mathbb{R}^{2f}, \qquad (q,v) \longrightarrow (q,p)$$

wegen (9.27) lokal invertierbar, und damit ein lokaler Diffeomorphismus ist.

Nach unseren allgemeinen Betrachtungen können wir aus der HAMILTON-Funktion die LAGRANGE-Funktion zurückgewinnen,

$$L(t,q,\dot{q}) = \max_p \left\{p_i \dot{q}^i - H(t,q,p)\right\} = p_i(t,q,\dot{q})\, q^i - H\big(t,q,p(t,q,\dot{q})\big), \tag{9.30}$$

wobei die maximierenden kanonischen Impulse $p_i(t,q,\dot{q})$ durch Auflösung der Gleichungen

$$\dot{q}^i = \dot{q}^i(t,q,p) = \frac{\partial H}{\partial p_i} \tag{9.31}$$

zu berechnen sind. Abschließend bemerken wir, daß der *kanonische Impuls p_i* im Allgemeinen von dem *kinetischen (mechanischen) Impuls $m\dot{q}^i$* zu unterscheiden ist.

Ableitung der Hamilton-Gleichungen aus dem Extremalprinzip: Auch die HAMILTON-Gleichungen sind die EULER-Gleichungen eines (ausgearteten) Variationsproblems. Die Wirkung ist

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(t,q,p,\dot{q},\dot{p})dt, \qquad \mathcal{L}(t,q,p,\dot{q},\dot{p}) = p_i \dot{q}^i - H(t,q,p). \tag{9.32}$$

Dabei wird bezüglich aller Bahnen im Phasenraum extremiert, wobei diese einen festen Anfangs- und Endpunkt haben,

$$\delta q(t_j) = \delta p(t_j) = 0, \qquad j = 1, 2. \tag{9.33}$$

Die EULER-Gleichungen lauten

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{p}^i} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial p_i} \quad , \quad \frac{d}{dt}\frac{\mathcal{L}}{\partial \dot{q}^i} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q^i}$$

Wegen $\partial L/\partial q = -\partial H/\partial q$ sind dies gerade die HAMILTON'schen Bewegungsgleichungen,

$$\dot{q}^i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad , \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q^i}, \tag{9.34}$$

was zu zeigen war. Das Variationsproblem ist singulär, da die Determinante der Matrix der zweiten Ableitungen verschwindet,

$$\det \begin{pmatrix} \partial^2\mathcal{L}/\partial\dot{q}\partial\dot{q} & \partial^2\mathcal{L}/\partial\dot{q}\partial\dot{p} \\ \partial^2\mathcal{L}/\partial\dot{p}\partial\dot{q} & \partial^2\mathcal{L}/\partial\dot{p}\partial\dot{p} \end{pmatrix} = 0.$$

9.1.3 Der Phasenraum

Die $2f$-dimensionalen Tupel

$$x = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q^1 \\ \vdots \\ q^f \\ p_1 \\ \vdots \\ p_f \end{pmatrix} \tag{9.35}$$

sind Koordinaten im *Phasenraum* Γ. Dieser Raum ist im allgemeinen eine Mannigfaltigkeit. Die kanonischen Bewegungsgleichungen in Γ sind von erster Ordnung in der Zeit,

$$\dot{x}(t) = X_H(t, x). \tag{9.36}$$

Die *Trajektorien* $x = x(t, t_0, x_0)$ mit den Anfangsbedingungen $x(t_0) = x_0$ sind Integralkurven des Vektorfeldes X_H. Eine Trajektorie beschreibt die zeitliche Entwicklung *eines* festen Anfangszustandes $x_0 \in \Gamma$. Dagegen ist die Abbildung, welche für eine *feste Zeit* jedem Anfangspunkt $x_0 \in \Gamma$ den Punkt $x(t) \in \Gamma$ zuordnet, eine Abbildung des Phasenraumes auf sich, und heißt der *Fluß* in Γ. Bis auf wenige Ausnahmen[3] geht durch jeden Punkt von Γ genau eine Trajektorie. Die Bewegung in Γ entspricht also einer Strömung.

HAMILTON'sche Systeme sind besonders einfach. In diesem Fall ist der Fluß von einer speziellen Form,

$$\dot{x} \equiv \begin{pmatrix} \dot{q} \\ \dot{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial p} \\ -\frac{\partial H}{\partial q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1}_f \\ -\mathbb{1}_f & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial q} \\ \frac{\partial H}{\partial p} \end{pmatrix}, \tag{9.37}$$

[3] bei denen die Lipschitzbedingung nicht erfüllt ist.

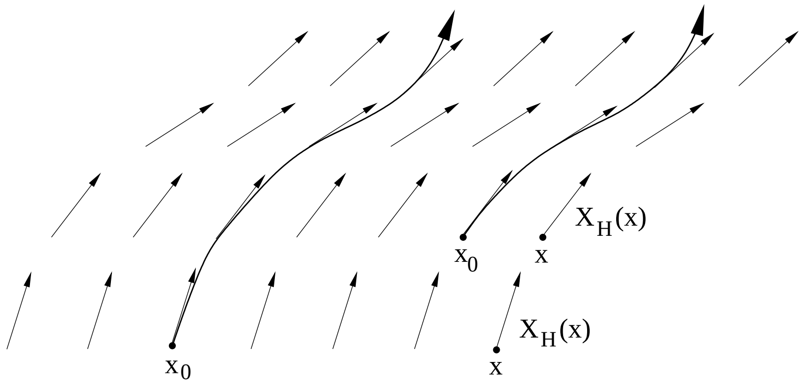

Abbildung 9.2: *Die Lösungen sind Integralkurven zum* HAMILTON*'schen Vektorfeld X_H.*

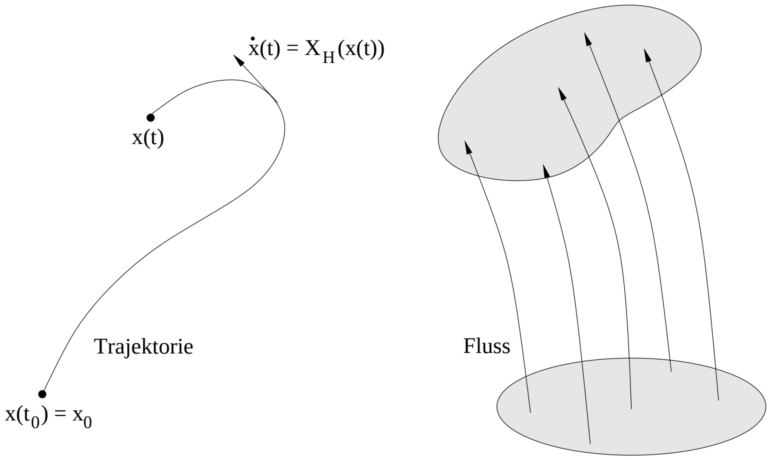

Abbildung 9.3: *Trajektorie und Fluß im Phasenraum*

also in Kurzschreibweise

$$\dot{x}(t) = X_H(t, x), \quad \text{wobei} \quad X_H = J\nabla_x H, \tag{9.38}$$

mit einer schiefsymmetrischen $2f \times 2f$-Matrix

$$J = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1}_f \\ -\mathbb{1}_f & 0 \end{pmatrix}, \tag{9.39}$$

die auch *symplektische Metrik* genannt wird. Die transponierte Matrix ist $J^T = -J$ und es gelten die Relationen

$$J^T J = J J^T = \mathbb{1}_{2f}, \quad \text{so daß} \quad J^T = -J = J^{-1} \quad \text{und} \quad J^2 = -\mathbb{1}_{2f}. \tag{9.40}$$

Die symplektische Matrix hat die Determinante $\det J = 1$.

Die Tangentialvektoren an einer Trajektorie sind gleich dem HAMILTON'schen Vektorfeld X_H am entsprechenden Punkt im Phasenraum, und $X_H(x)$ ist gleich der symplektischen Metrik J, angewandt auf den Gradienten von $H : \Gamma \to \mathbb{R}$. Für ein autonomes System ist H konstant und jede Trajektorie verläuft auf einer durch den Anfangspunkt x_0 festgelegten Hyperfläche in Γ, der *Energiefläche.*

9.2 Zeitliche Änderung von Observablen

Wie wollen die zeitliche Änderung einer Observablen

$$F = F(t, q^i, p_i) = F(t, q, p) \tag{9.41}$$

des betrachteten Systems, wie z.B. der Energie, des Impulses oder Drehimpulses, berechnen. Dazu bilden wir

$$\frac{dF}{dt} = \sum_{i=1}^{f} \Big(\frac{\partial F}{\partial q^i} \dot{q}^i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i \Big) + \frac{\partial F}{\partial t} \tag{9.42}$$

und benutzen die kanonischen Gleichungen:

$$\frac{dF}{dt} = \sum_{i=1}^{f} \Big(\frac{\partial F}{\partial q^i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q^i} \Big) + \frac{\partial F}{\partial t}. \tag{9.43}$$

Diese Gleichung läßt sich mit Hilfe der POISSON *Klammer*, definiert durch

$$\{F, G\} = \sum_{i=1}^{f} \Big(\frac{\partial F}{\partial q^i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q^i} \Big) \tag{9.44}$$

schreiben als

$$\frac{dF}{dt} = \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t}. \tag{9.45}$$

Verschwindet die POISSON-Klammer $\{F, H\}$ einer nicht explizit zeitabhängigen Funktion F mit der HAMILTON-Funktion, so ist F ein Integral der Bewegung,

$$\{F, H\} = 0 \Longleftrightarrow F \text{ Integral der Bewegung} \qquad \big(\frac{\partial F}{\partial t} = 0\big). \tag{9.46}$$

Wir diskutieren diese Bewegungsgleichungen für die wichtigsten Observablen.

Energieerhaltung: Wegen $\{H, H\} = 0$ ist für $F = H$

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t}. \tag{9.47}$$

Falls die HAMILTON-Funktion nicht explizit von der Zeit abhängt, ist sie eine Konstante der Bewegung. Dieses bekannte Resultat führt auf die Erhaltung der Energie für abgeschlossene Systeme.

Kanonische Gleichungen: Wegen

$$\frac{\partial q^i}{\partial q^j} = \delta^i{}_j \quad \text{und} \quad \frac{\partial q^i}{\partial p_j} = 0$$

ist die Zeitableitung der Observablen q^i gleich

$$\dot{q}^i = \{q^i, H\} = \frac{\partial H}{\partial p_i}. \tag{9.48}$$

Ebenso ist die Zeitableitung der Impulse

$$\dot{p}_i = \{p_i, H\} = -\frac{\partial H}{\partial q^i}. \tag{9.49}$$

Nicht unerwartet sind dies die bekannten kanonischen Bewegungsgleichungen für die Koordinaten im Phasenraum.

Mit Hilfe der symplektischen Metrik in (9.39) kann die POISSON-Klammer von zwei Funktionen auch folgendermassen geschrieben werden,

$$\{F, G\} = \sum_{i=1}^{f} \Big(\frac{\partial F}{\partial q^i}\frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial G}{\partial q^i}\Big) = \sum_{\alpha,\beta=1}^{2f} \frac{\partial F}{\partial x_\alpha} J_{\alpha\beta} \frac{\partial G}{\partial x_\beta} \equiv \nabla_x F \cdot J\, \nabla_x G. \tag{9.50}$$

9.2.1 Poisson-Klammern

Die in (9.44) oder (9.50) eingeführten POISSON-Klammern sind über das Problem der zeitlichen Änderung einer Observablen hinaus von Bedeutung, da sie erlauben, die klassische Mechanik in einer Form darzustellen, welche den Zusammenhang zur Quantenmechanik besonders klar aufzeigt. Wir geben daher im Folgenden eine Reihe wichtiger Eigenschaften der POISSON-Klammern an, welche die Berechnung von Klammerausdrücken erleichtern. Es seien $F, G, H \in C^\infty(\Gamma)$ und a die konstante Funktion. Dann gelten folgende Regeln:

- **Antisymmetrie:** Es gilt offensichtlich

$$\{F, G\} = -\{G, F\}, \tag{9.51}$$

- **(Bi)Linearität:** Auch die Bilinearität

$$\{F, G + H\} = \{F, G\} + \{F, H\} \quad \text{und} \quad \{F, aG\} = a\{F, G\} \tag{9.52}$$

  folgt unmittelbar aus der Definition (9.50).

- **Produktregel:** Die Produkt- oder Derivationsregel

$$\{F, G \cdot H\} = F \cdot \{G, H\} + \{F, G\} \cdot H \tag{9.53}$$

ist ebenfalls leicht zu beweisen. Sie folgt aus der Produktregel für die Differenziation,

$$\{F, G\cdot H\} = \sum_i \Big(\frac{\partial F}{\partial q^i}\Big[\frac{\partial G}{\partial p_i}H + G\frac{\partial H}{\partial p_i}\Big] - \Big[q^i \leftrightarrow p_i\Big]\Big) = G\cdot\{F,H\} + \{F,G\}\cdot H.$$

- **Jacobi-Identität:** Die Identität

$$\{F,\{G,H\}\} + \{G,\{H,F\}\} + \{H,\{F,G\}\} = 0 \tag{9.54}$$

  läßt sich durch Nachrechnen bestätigen.

Zum Beispiel ist

$$\{F,\{G,H\}\} = \partial_\alpha F J_{\alpha\beta}\partial_\beta\big(\partial_\gamma G J_{\gamma\delta}\partial_\delta H\big) = \partial_\alpha F J_{\alpha\beta}\partial_\beta\partial_\gamma G J_{\gamma\delta}\partial_\delta H + \partial_\alpha F J_{\alpha\beta}\partial_\gamma G J_{\gamma\delta}\partial_\beta\partial_\delta H,$$

wozu wir die entsprechenden Terme in der zyklischen Summe (9.54) addieren müssen,

$$\begin{aligned}(9.54) &= \partial_\alpha F J_{\alpha\beta}\partial_\beta\partial_\gamma G J_{\gamma\delta}\partial_\delta H + \partial_\alpha F J_{\alpha\beta}\partial_\gamma G J_{\gamma\delta}\partial_\beta\partial_\delta H\\ &+ \partial_\alpha G J_{\alpha\beta}\partial_\beta\partial_\gamma H J_{\gamma\delta}\partial_\delta F + \partial_\alpha G J_{\alpha\beta}\partial_\gamma H J_{\gamma\delta}\partial_\beta\partial_\delta F\\ &+ \partial_\alpha H J_{\alpha\beta}\partial_\beta\partial_\gamma F J_{\gamma\delta}\partial_\delta G + \partial_\alpha H J_{\alpha\beta}\partial_\gamma F J_{\gamma\delta}\partial_\beta\partial_\delta G,\end{aligned} \tag{9.55}$$

Wir betrachten diejenigen Terme, welche zweite Ableitungen der Funktion F enthalten, also den vierten und fünften Term auf der rechten Seite,

$$(9.54) = \partial_\alpha G J_{\alpha\beta}\partial_\gamma H J_{\gamma\delta}\partial_\beta\partial_\delta F + \partial_\alpha H J_{\alpha\beta}\partial_\beta\partial_\gamma F J_{\gamma\delta}\partial_\delta G + \dots.$$

Wählen wir für die Summationsindizes im letzten Term anstelle von $(\alpha,\beta,\gamma,\delta)$ die Buchstaben $(\gamma,\delta,\beta,\alpha)$ und benutzen, daß J schiefsymmetrisch ist, so heben sich diese beiden Terme gegenseitig weg. Genauso heben sich die verbleibenden vier Terme in (9.55) weg, und dies beweist dann die Jacobi-Identität.

Wichtige Beispiele sind:

Koordinatenfunktionen: Die Poisson-Klammern der Koordinatenfunktionen,

$$\{p_i,p_j\} = 0,\quad \{q^i,q^j\} = 0,\quad \{q^i,p_j\} = \delta^i{}_j, \tag{9.56}$$

werden oft als *fundamentale Klammern* bezeichnet. Sie können mit Hilfe der symplektischen Metrik J in (9.39) auch in die elegante Form

$$\{x_\alpha,x_\beta\} = J_{\alpha\beta},\qquad x=(q,p), \tag{9.57}$$

gebracht werden.

Drehimpulse: Wir berechnen die Poisson-Klammern zwischen den Komponenten des Drehimpulses,

$$\mathbf{L} = \mathbf{r}\wedge\mathbf{p}\quad \text{oder}\quad L_i = \epsilon_{ijk}x_j p_k. \tag{9.58}$$

Benutzen wir die Linearität und Produktregel (9.53) so ergibt sich

$$\begin{aligned}\{L_i,L_j\} &= \epsilon_{ipq}\epsilon_{jrs}\{x_p p_q, x_r p_s\} = \epsilon_{ipq}\epsilon_{jrs}\big(x_r\underbrace{\{x_p,p_s\}}_{\delta_{ps}}p_q + x_p\underbrace{\{p_q,x_r\}}_{-\delta_{qr}}p_s\big)\\ &= \epsilon_{ipq}\epsilon_{jrp}x_r p_q - \epsilon_{ipq}\epsilon_{jqs}x_p p_s = x_i p_j - x_j p_i,\end{aligned}$$

beziehungsweise

$$\{L_1, L_2\} = L_3, \quad \{L_2, L_3\} = L_1, \quad \{L_3, L_1\} = L_2 \quad \text{oder} \quad \{L_i, L_j\} = \epsilon_{ijk} L_k. \tag{9.59}$$

Das quantenmechanische Analogon dieser Klammern ist der Ausgangspunkt für die Quantisierung des Drehimpulses.

Als Anwendung der JACOBI'schen Identität folgt der Satz von POISSON:

Satz: *Sind F und G Integrale der Bewegung, dann ist auch $\{F, G\}$ ein Integral der Bewegung.*

Zum Beispiel: sind L_1 und L_2 Integrale der Bewegung, so ist auch L_3 ein Integral der Bewegung. Der Beweis des Satzes ist denkbar einfach: Wegen der JACOBI-Identität

$$\{\{F, G\}, H\} + \{\underbrace{\{H, F\}}_{=0}, G\} + \{\underbrace{\{G, H\}}_{=0}, F\} \overset{(9.54)}{=} 0 \longrightarrow \{\{F, G\}, H\} = 0$$

muß der erste Term auf der linken Seite verschwinden, was bedeutet, daß $\{F, G\}$ ein Integral der Bewegung ist.

Wegen der Derivationsregel gilt aber auch der

Satz: *Sind F und G Integrale der Bewegung, dann sind auch aF, $F + G$ und $F \cdot G$ Integrale der Bewegung.*

Beweis: Verschwinden die Klammern von F und G mit der HAMILTON-Funktion, so verschwindet wegen (9.52) auch die Klammer jeder Linearkombination von F und G mit H. Mit der Derivationsregel gilt weiterhin

$$\{F \cdot G, H\} \overset{(9.53)}{=} F \cdot \underbrace{\{G, H\}}_{=0} + \underbrace{\{F, H\}}_{=0} \cdot G = 0.$$

Die Menge aller C^∞-Integrale der Bewegung bilden einen Vektorraum, der bezüglich der punktweisen Multiplikation der Funktionen abgeschlossen ist, d.h. eine Algebra $\mathcal{A}_H$. Diese Algebra ist abgeschlossen bezüglich $\{.,.\}$ (hier ist C^∞ nötig) und damit eine LIE-*Algebra.* Sie ist nichttrivial, da für autonome Systeme offensichtlich $H \in \mathcal{A}_H$ ist. Es kann allerdings sein, daß $\mathcal{A}_H$ nur Funktionen von H enthält. Dies ist zum Beispiel dann der Fall, wenn jede *Energiefläche* (definiert durch $H = E$ =const.) eine transitive Bahn enthält. Eine Bahn heißt transitiv, wenn ihr Abschluß die ganze Energiefläche ist.

Für ein abgeschlossenes System (ohne äußere Kräfte und ohne äußere Zwangsbedingungen) mit HAMILTON-Funktion

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2m_i} \mathbf{p}_i^2 + \sum_{i<j} V_{ij}\left(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|\right) \tag{9.60}$$

sind der Gesamtimpuls $\mathbf{P} = \sum \mathbf{p}_i$, der zur Schwerpunktskoordinate $M\mathbf{R} = \sum m_i \mathbf{r}_i$ konjugiert ist,

$$\{R_a, R_b\} = \{P_a, P_b\} = 0, \qquad \{R_a, P_b\} = \delta_{ab}, \tag{9.61}$$

sowie der Drehimpuls im Schwerpunktsystem, $\mathbf{L}' = \sum \mathbf{L}_i - \mathbf{R} \wedge \mathbf{P}$, Integrale der Bewegung,

$$\{P_a, H\} = 0 \quad , \quad \{L'_a, H\} = 0 \qquad a = 1, 2, 3, \tag{9.62}$$

Diese haben folgende Klammern untereinander,

$$\{H, H\} = \{P_a, H\} = \{P_a, P_b\} = 0, \qquad \{L'_a, H\} = \{L'_a, P_b\} = 0, \qquad \{L'_a, L'_b\} = \epsilon_{abc} L'_c, \tag{9.63}$$

und erzeugen eine LIE-Algebra $\mathcal{A}_H$. Aber $\mathcal{A}_H$ ist nicht ABELSCH, d.h. nicht alle Klammern zweier Elemente aus $\mathcal{A}_H$ verschwinden. Zum Beispiel ist $\{L'_1, L'_2\} = L'_3$. Aber die Funktionen

$$H, \quad P_a, \quad L'_3 \quad \text{und} \quad \mathbf{L}'^2 = L'^2_1 + L'^2_2 + L'^2_3 \tag{9.64}$$

haben alle verschwindende Klammern untereinander. In der analytischen Mechanik zeigt man, daß ein System mit f unabhängigen Integralen der Bewegung mit verschwindenden POISSON-Klammern[4] integrabel ist. Für Details verweise ich auf das ausführliche Lehrbuch von MARSDEN und RATIU [8] über analytische Mechanik.

9.3 Kanonische Transformationen

Eine Motivation für die Untersuchung von kanonischen Transformationen ist die Suche nach neuen Koordinaten im Phasenraum

$$Q^i = Q^i(t, q, p) \quad \text{und} \quad P_i = P_i(t, q, p), \tag{9.65}$$

so daß möglichst viele von ihnen zyklisch werden.

Allerdings muß die Form der HAMILTON-Gleichungen beim Koordinaten-Wechsel erhalten bleiben, denn zyklische Koordinaten sind ja gerade im HAMILTON-Formalismus so außerordentlich nützlich. Wir brauchen also neben den neuen Koordinaten (Q, P) auch noch eine Funktion H', welche die Rolle der HAMILTON-Funktion übernimmt. Wir definieren also

Definition: *Die Transformation*

$$Q^i = Q^i(t, q, p) \quad , \quad P_i = P_i(t, q, p) \tag{9.66}$$

heißt kanonisch, falls eine Funktion $H' = H'(t, Q, P)$ existiert, so daß

$$\dot{Q}^i = \frac{\partial H'}{\partial P_i} \quad \text{und} \quad \dot{P}^i = -\frac{\partial H'}{\partial Q^i} \tag{9.67}$$

gilt. Die kanonischen Gleichungen sind forminvariant bei kanonischen Transformationen.

9.3.1 Eingeschränkte kanonische Transformationen

Für die folgende Diskussion ist es wieder angebracht die Orts- und Impulskoordinaten zusammenzufassen, insbesondere da kanonische Transformationen Orte und Impulse ineinander transformieren können. Es sei also

[4] und weiteren technischen Annahmen über Γ

$$x = (q,p) \quad \text{und} \quad y = (Q,P), \tag{9.68}$$

zwei Koordinatensysteme in Γ. Eine *zeitunabhängige* umkehrbare Transformation $x \longrightarrow y = y(x)$ ist eingeschränkt kanonisch, wenn die kanonischen Gleichungen

$$\dot{x}_\alpha = \sum_{\beta=1}^{2f} J_{\alpha\beta} \frac{\partial H}{\partial x_\beta} \quad \overset{J^2=-1\!\!1}{\Longleftrightarrow} \quad \frac{\partial H}{\partial x_\alpha} = -\sum_{\beta=1}^{2f} J_{\alpha\beta} \dot{x}_\beta, \tag{9.69}$$

die entsprechenden Gleichungen in den neuen Koordinaten implizieren,

$$\dot{y}_\alpha = \sum_{\beta=1}^{2f} J_{\alpha\beta} \frac{\partial H'}{\partial y_\beta} \quad \text{mit} \quad H'(y) = H\big(x(y)\big). \tag{9.70}$$

Die Transformation ist nur eingeschränkt kanonisch, weil sie zeitunabhängig ist. Für solche Transformationen ist die neue HAMILTON-Funktion $H'(y)$ gleich der alten HAMILTON-Funktion, umgerechnet in die neuen Koordinaten, $H'(y) = H\big(x(y)\big)$. Weiter unten in diesem Kapitel werden wir allgemeinere zeitabhängige Transformationen untersuchen, für welche dies nicht mehr der Fall zu sein braucht.

Um festzustellen, für welche $y = y(x)$ die HAMILTON'schen Bewegungsgleichungen erfüllt sind, müssen wir sie auf $x-$Koordinaten umrechnen:

$$\sum_\beta \frac{\partial y_\alpha}{\partial x_\beta} \dot{x}_\beta = \dot{y}_\alpha \overset{(9.70)}{=} \sum_{\beta,\sigma} J_{\alpha\beta} \frac{\partial H}{\partial x_\sigma} \frac{\partial x_\sigma}{\partial y_\beta} \overset{(9.69)}{=} -\sum_{\beta,\sigma,\rho} J_{\alpha\beta} \frac{\partial x_\sigma}{\partial y_\beta} J_{\sigma\rho} \dot{x}_\rho. \tag{9.71}$$

Hier begegnen wir der JACOBI-*Matrix* der als umkehrbar vorausgesetzten Transformation $x \to y(x)$ und ihrer Inversen,

$$\frac{\partial y_\alpha}{\partial x_\beta} = M_{\alpha\beta} \qquad \text{und} \qquad \frac{\partial x_\alpha}{\partial y_\beta} = \left(M^{-1}\right)_{\alpha\beta}. \tag{9.72}$$

Man zeigt leicht, daß das Produkt dieser Matrizen gleich der Einheitsmatrix ist,

$$\sum_\sigma M_{\alpha\sigma} \left(M^{-1}\right)_{\sigma\beta} = \sum_\sigma \frac{\partial y_\alpha}{\partial x_\sigma} \frac{\partial x_\sigma}{\partial y_\beta} = \frac{\partial y_\alpha}{\partial y_\beta} = \delta_{\alpha\beta}.$$

Mit diesen Definitionen der JACOBI-Matrix und ihrer Inversen lauten die Bedingungen (9.71)

$$\sum_\beta M_{\alpha\beta} \dot{x}_\beta = -\sum_\beta \left(J M^{-1T} J\right)_{\alpha\beta} \dot{x}_\beta.$$

Da diese Gleichungen für beliebige Geschwindigkeiten $\dot{x}$ im Phasenraum gelten müssen, schließen wir mit $J^2 = -1\!\!1$

$$JM = M^{-1T} J.$$

Wir transponieren diese Gleichung und berücksichtigen, daß J schiefsymmetrisch ist. Dann folgt

$$M^T J M = J. \tag{9.73}$$

Matrizen, welche diese Bedingung erfüllen, heißen *symplektische Matrizen.* Aus (9.73) folgt

$$\det M^T \det J \det M = \det J \quad \text{oder} \quad \det M = \pm 1. \tag{9.74}$$

Die Menge der symplektischen $2f \times 2f$-Matrizen bilden die *symplektische Gruppe $Sp(2f)$*. Das bedeutet:

1. Sind M_1 und M_2 symplektisch, so ist es auch $M_1 M_2$.
2. Das Produkt ist assoziativ, $M_1(M_2 M_3) = (M_1 M_2) M_3$.
3. Die Identitätsmatrix ist symplektisch.
4. Ist M symplektisch, so ist es auch M^{-1}.

Die erste Eigenschaft ist evident,

$$(M_1 M_2)^T J (M_1 M_2) = M_2^T \underbrace{M_1^T J M_1}_{J} M_2 = M_2^T J M_2 = J,$$

genauso wie die dritte. Das Matrixprodukt ist assoziativ und es verbleibt der Beweis der letzten Eigenschaft:

$$J = \underbrace{(MM^{-1})^T}_{1\!\!1} J \underbrace{(MM^{-1})}_{1\!\!1} = M^{-1T} \underbrace{M^T J M}_{J} M^{-1} = M^{-1T} J M^{-1} \Longrightarrow M^{-1} \in Sp(2f).$$

Aus den genannten Eigenschaften folgt nun, daß mit M auch M^T symplektisch ist, da

$$M^{-1T} J M^{-1} = J \quad \stackrel{\text{Inverse}}{\Longrightarrow} \quad M J^{-1} M^T = J^{-1} \quad \text{oder} \quad M J M^T = J$$

folgt.

Wir fassen zusammen: *Eine zeitunabhängige Koordinatentransformation*

$$\begin{aligned} (x_1, \ldots, x_{2f}) &\longrightarrow (y_1, \ldots, y_{2f}) \qquad \text{bzw.} \\ (q^1, \ldots, q^f, p_1, \ldots, p_f) &\longrightarrow (Q^1, \ldots, Q^f, P_1, \ldots, P_f) \end{aligned}$$

ist eingeschränkt kanonisch, falls ihre JACOBI-*Matrix (9.72) symplektisch ist.*

Wichtige Beispiele sind Transformationen

$$q \longrightarrow Q = Q(q) \tag{9.75}$$

der verallgemeinerten Koordinaten untereinander. Bei entsprechender Transformation der Impulse,

$$p \longrightarrow P = P(q, p) \tag{9.76}$$

sind (9.75) und (9.76) eingeschränkte kanonische Transformationen. Dies folgt aus der Invarianz der LAGRANGE-Gleichungen unter beliebigen Transformationen der Art (9.75), und somit nach der LEGENDRE-Transformation auch der kanonischen Gleichungen. Die Transformation der Impulse ist dabei durch

$$P_i = \frac{\partial}{\partial \dot{Q}^i} L(Q,\dot{Q}) = \sum_{j=1}^{f} \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^j}}_{p_j} \underbrace{\frac{\partial \dot{q}^i}{\partial \dot{Q}^i}}_{\partial q^j/\partial Q^i} + \sum_j \frac{\partial L}{\partial q^j} \underbrace{\frac{\partial q^j}{\partial \dot{Q}^j}}_{=0} = \sum_j p_j \frac{\partial q^j}{\partial Q^i}, \tag{9.77}$$

gegeben, denn $(q,\dot{q})$ und $(Q,\dot{Q})$ sind unabhängige Variablen und somit $\partial q^j/\partial \dot{Q}^i = 0$.

Die Klasse der kanonischen Transformationen ist wesentlich größer als (9.75), insbesondere können auch Lagekoordinaten und Impulse vermischt werden. Dies ist ein Vorzug der HAMILTON'schen Formulierung der Mechanik. Zum Beispiel ist die Transformation

$$\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} Q \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ -\mathbb{1} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}, \quad \text{bzw.} \quad y = Jx, \tag{9.78}$$

welche die q und p vertauscht, kanonisch, da

$$M_{\alpha\beta} = \frac{\partial y_\alpha}{\partial x_\beta} = J_{\alpha\beta} \Longrightarrow M^T J M = J^T J J = J$$

ist. Das Beispiel verdeutlicht, daß Koordinaten und Impulse 'austauschbar' und damit gleichberechtigt sind. Beide Freiheitsgrade werden zu abstrakten Koordinaten, in denen sich die HAMILTON-Funktion auf dem $2f$-dimensionalen Phasenraum darstellen läßt.

Es stellt sich nun die natürliche Frage, ob wir das gleiche Ergebnis erhalten, wenn wir die POISSON-Klammern mit den ursprünglichen Variablen (q,p) berechnen oder den neuen Variablen (Q,P), die durch eine eingeschränkte kanonische Transformation aus den alten Variablen hervorgingen. Es gilt der

Satz: *Die* POISSON*-Klammer ist unabhängig vom Satz der kanonischen Variablen, der für die Definition verwendet wird.*

Zuerst zeigen wir, daß die POISSON-Klammern der neuen Koordinaten (als Funktionen der alten Koordinaten) gleich den Klammern der alten Koordinaten sind. Der Beweis ist einfach,

$$\{y_\alpha, y_\beta\} = \frac{\partial y_\alpha}{\partial x_\gamma} J_{\gamma\delta} \frac{\partial y_\beta}{\partial x_\delta} = M_{\alpha\gamma} J_{\gamma\delta} M^T_{\delta\beta} = \left(M J M^T\right)_{\alpha\beta} = J_{\alpha\beta},$$

also gilt

$$x \longrightarrow y = y(x) \text{ ist kanonisch} \Longleftrightarrow \{y_\alpha, y_\beta\} = \{x_\alpha, x_\beta\} = J_{\alpha\beta}, \tag{9.79}$$

wie behauptet. Nun nehmen wir an, daß

$$\{F(q,p), G(q,p)\}_{q,p} \equiv \frac{\partial F(x)}{\partial x_\alpha} J_{\alpha\beta} \frac{\partial G(x)}{\partial x_\beta} = H(q,p) \tag{9.80}$$

für beliebige C^∞-Funktionen F und G auf Γ gelte. Dabei wird die Klammer mit den alten Koordinaten und der symplektischen Metrik J berechnet. Wir müssen die entsprechende Beziehung für die transformierten Funktionen zeigen, daß heißt wir müssen zeigen, daß

$$\{F'(Q,P), G'(Q,P)\}_{Q,P} \equiv \frac{\partial F'(y)}{\partial y_\alpha} J_{\alpha\beta} \frac{\partial G'(y)}{\partial y_\beta} = H'(Q,P), \tag{9.81}$$

gilt, wobei F', G' und H' die auf die neuen Variablen transformierten Funktionen F, G und H sind. Zum Beispiel ist

$$F'(Q,P) = F\big(q(Q,P), p(Q,P)\big) \quad \text{bzw.} \quad F'(y) = F\big(x(y)\big). \tag{9.82}$$

Die Klammer in (9.81) wird mit den neuen Koordinaten und der symplektischen Metrik J berechnet.

Der Beweis ist nicht sehr schwierig. Wir führen wieder die Koordinaten $x = (q,p)$ und $y = (Q,P)$ in Γ ein und finden

$$\begin{aligned}
\{F', G'\}_{Q,P} &= \frac{\partial F'}{\partial y_\alpha} J_{\alpha\beta} \frac{\partial G'}{\partial y_\beta} = \frac{\partial F}{\partial x_\gamma} \frac{\partial x_\gamma}{\partial y_\alpha} J_{\alpha\beta} \frac{\partial x_\delta}{\partial y_\beta} \frac{\partial G}{\partial x_\delta} = \frac{\partial F}{\partial x_\gamma} \big(M^{-1} J M^{-1T}\big)_{\gamma\delta} \frac{\partial G}{\partial x_\delta} \\
&= \frac{\partial F}{\partial x_\gamma} J_{\gamma\delta} \frac{\partial G}{\partial x_\delta} = \{F, G\}_{q,p} = H(q,p) = H'(Q,P),
\end{aligned}$$

was zu zeigen war. Betrachten wir zum Beispiel den *anharmonischen Oszillator* mit Hamilton-Funktion

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 + \frac{\lambda}{4} q^4$$

und kanonischen Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned}
\dot{q} &= \{q, H\} = \frac{1}{m} p &&= \frac{\partial H}{\partial p} \\
\dot{p} &= \{p, H\} = -m\omega^2 q - \lambda q^3 &&= -\frac{\partial H}{\partial q}.
\end{aligned} \tag{9.83}$$

Wir führen neue kanonische Koordinaten gemäß (9.78) ein, d.h.

$$Q = p \quad \text{und} \quad P = -q. \tag{9.84}$$

Die transformierte Hamilton-Funktion hat die Form

$$H' = \frac{1}{2m} Q^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 P^2 + \frac{\lambda}{4} P^4,$$

und die kanonischen Gleichungen lauten

$$\begin{aligned}
\dot{Q} &= \{Q, H'\} = m\omega^2 P + \lambda P^3 &&= \frac{\partial H'}{\partial P} \\
\dot{P} &= \{P, H'\} = -\frac{1}{m} Q &&= -\frac{\partial H'}{\partial Q}.
\end{aligned} \tag{9.85}$$

Für die einfache lineare kanonische Transformation (9.84) sieht man sofort, daß die Bewegungsgleichungen (9.83) und (9.85) für den anharmonischen Oszillator äquivalent sind.

9.3.2 Kanonische Transformationen für das Dreikörperproblem

Das allgemeine Problem von drei gravitativ wechselwirkender Körpern kann mit den gegenwärtig bekannten Funktionen nicht gelöst werden. Schon Newton verwandte viel Mühe auf das Studium des Systems Sonne, Erde und Mond. Seit etwa 1750 haben sich bedeutende Mathematiker wie etwa EULER, LAGRANGE oder POINCARÉ daran versucht. EULER fand eine spezielle Lösung, bei welcher die drei Massen auf einer Geraden liegen. Eine weitere Lösung stammt von LAGRANGE und beschreibt die ebene Bewegung von drei Körpern, welche die Ecken eines gleichseitiges Dreieck bilden. Diese Lösungen und das restringierte Dreikörperproblem mit $m_3 \ll m_1, m_2$ haben sie in den Übungen bereits kennengelernt.

Wir betrachten hier das allgemeine 3-Körperproblem mit HAMILTON-Funktion

$$H = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{2m_i}\mathbf{p}_i^2 + \sum_{i<j=1}^{3} V_{ij}(r_{ij}), \qquad r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|. \tag{9.86}$$

Wir brauchen hier noch nicht anzunehmen, daß V das NEWTON'sche Gravitationspotential ist. Wir folgen POINCARÉ und führen neue Koordinaten ein. $\mathbf{R}_1$ und $\mathbf{R}_2$ seien die Positionen der Körper m_1 und m_2 relativ zum Körper m_3 und $\mathbf{P}_3$ sei der Gesamtimpuls des Systems:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_1 &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3 \quad , \quad \mathbf{P}_1 = \mathbf{p}_1, \\ \mathbf{R}_2 &= \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3 \quad , \quad \mathbf{P}_2 = \mathbf{p}_2, \\ \mathbf{R}_3 &= \mathbf{r}_3 \qquad\quad\;\; , \quad \mathbf{P}_3 = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3. \end{aligned} \tag{9.87}$$

Wie in (9.35) definieren wir Koordinaten im 18-dimensionalen Phasenraum der drei Körper. Dann schreibt sich diese Transformation gemäß

$$y = Mx, \quad \text{wobei} \quad x = \begin{pmatrix} \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{r}_3 \\ \mathbf{p}_1 \\ \mathbf{p}_2 \\ \mathbf{p}_3 \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_1 \\ \mathbf{R}_2 \\ \mathbf{R}_3 \\ \mathbf{P}_1 \\ \mathbf{P}_2 \\ \mathbf{P}_3 \end{pmatrix}, \quad M = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 & -\mathbb{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbb{1} & -\mathbb{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbb{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbb{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbb{1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbb{1} & \mathbb{1} & \mathbb{1} \end{pmatrix}. \tag{9.88}$$

Dabei ist $\mathbb{1}$ die 3-dimensionale Einheitsmatrix. Man prüft leicht nach, das diese lineare Abbildung kanonisch ist, $M^T J M = J$, und nach (9.79) die POISSON-Klammern der neuen und alten Koordinaten gleich sind, $\{y_\alpha, y_\beta\} = \{x_\alpha, x_\beta\}$. Die transformierte HAMILTON-Funktion lautet

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2}\Big(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_3}\Big)\mathbf{P}_1^2 + \frac{1}{2}\Big(\frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3}\Big)\mathbf{P}_2^2 \\ &+ \frac{1}{2m_3}\big(\mathbf{P}_3^2 + 2\mathbf{P}_1\cdot\mathbf{P}_2 - 2\mathbf{P}_3\mathbf{P}_1 - 2\mathbf{P}_3\mathbf{P}_2\big) \\ &+ V_{12}(R_{12}) + V_{13}(R_1) + V_{23}(R_2). \end{aligned} \tag{9.89}$$

Die Koordinaten $\mathbf{R}_3$ treten in H nicht auf und sind daher *zyklisch.* Die entsprechenden Integrale der Bewegung sind die zu $\mathbf{R}_3$ konjugierten Impulse $\mathbf{P}_3 = \mathbf{P}$. Ohne Einschränkung der Allgemeinheit dürfen wir annehmen, daß $\mathbf{P} = \mathbf{o}$ ist, d.h. das der Massenschwerpunkt ruht. Die HAMILTON-Funktion des reduzierten Problems

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2}\Big(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_3}\Big)\mathbf{P}_1^2 + \frac{1}{2}\Big(\frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3}\Big)\mathbf{P}_2^2 + \frac{1}{m_3}\mathbf{P}_1\cdot\mathbf{P}_2 \\ &+ V_{12}(R_{12}) + V_{13}(R_1) + V_{23}(R_2). \end{aligned} \tag{9.90}$$

hängt nur noch von den Variablen $\mathbf{R}_i, \mathbf{P}_i,\ i = 1,2$ ab. Die Dimension des Phasenraumes ist damit von 18 auf 12 reduziert. Das reduzierte System (9.90) hat als Integrale der Bewegung die Energie,

$$H = \text{konstant}, \tag{9.91}$$

und die drei Komponenten des Drehimpulses

$$\mathbf{L} = \mathbf{R}_1 \wedge \mathbf{P}_1 + \mathbf{R}_2 \wedge \mathbf{P}_2. \tag{9.92}$$

Nun transformieren wir wiederum auf neue Koordinaten, um das System weiter zu reduzieren. Dazu führen wir neben dem System $(O, \mathbf{e}_i)$ ein rotierendes System $(O, \mathbf{e}'_i)$ ein. Dabei soll $\mathbf{e}'_1$ in Richtung der Knotenlinie der $(O, \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$-Ebene mit der momentanen Ebene der drei Körper zeigen, $\mathbf{e}'_2$ sei senkrecht auf $\mathbf{e}'_1$ und liege in der Ebene der drei Körper, und $\mathbf{e}'_3$ sei senkrecht auf der Bahnebene, siehe Abbildung (9.4). Dann seien (q_1, q_2) die Koordinaten des ersten Körpers relativ zum System $(\mathbf{R}_3, \mathbf{e}'_i)$ und (q_3, q_4) die Koordinaten des zweiten Körpers relativ zum gleichen System. Die fünfte Koordinate q_5 sei gleich dem EULER-Winkel φ zwischen $\mathbf{e}_1$ und der Knotenlinie und q_6 gleich dem Eulerwinkel ϑ. Hier dürfen wir unsere früheren Resultate über die Umrechnung zwischen

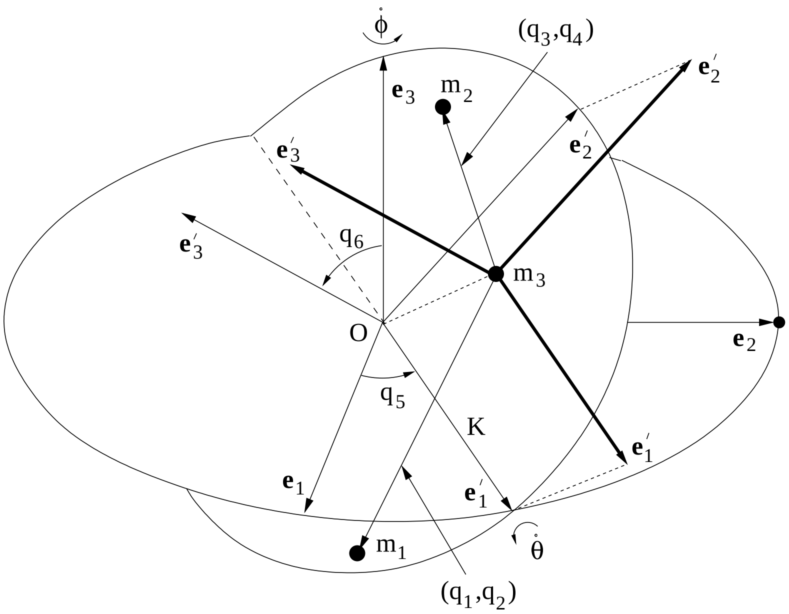

Abbildung 9.4: *Zur kanonischen Transformation.*

raumfesten und körperfesten System, und hier insbesondere die Formel (5.13) zusammen mit (5.6) übernehmen, wobei wir

$$(\varphi, \vartheta, \psi) = (q_5, q_6, 0)$$

setzen müssen. Der EULERwinkel ψ ist Null, da $\mathbf{e}'_1$ in Richtung der Knotenlinie zeigt. Damit sind die Ortsvektoren der Körper m_1 und m_2 gleich

$$
\begin{aligned}
\mathbf{R}_1 &= q_1\mathbf{e}_1' + q_2\mathbf{e}_2' = R(\mathbf{e}_3, q_5)R(\mathbf{e}_1, q_6)\begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ 0 \end{pmatrix} \\
\mathbf{R}_2 &= q_3\mathbf{e}_3' + q_4\mathbf{e}_2' = R(\mathbf{e}_3, q_5)R(\mathbf{e}_1, q_6)\begin{pmatrix} q_3 \\ q_4 \\ 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{9.93}
$$

Diese Formeln definieren die Transformation der Ortskoordinaten. Wegen

$$
\mathbf{R}_1^2 = q_1^2 + q_2^2, \quad \mathbf{R}_2^2 = q_3^2 + q_4^2 \quad \text{und} \quad (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)^2 = (q_1 - q_3)^2 + (q_2 - q_4)^2 \tag{9.94}
$$

ist die Umrechnung der potentiellen Energie in (9.90) einfach. Nach unseren obigen Bemerkungen kann diese Transformation der Ortskoordinaten zu einer kanonischen Transformation im Phasenraum erweitert werden. Gemäß (9.77) sind die zu den q_a kanonisch konjugierten Impulse

$$
p_a = \sum_{i=1}^{2} \mathbf{P}_i \frac{\partial \mathbf{R}_i}{\partial q_a}, \qquad a = 1, 2, \dots, 6.
$$

Eine kurze Rechnung ergibt

$$
p_1 = \mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{e}_1', \quad p_2 = \mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{e}_2', \quad p_3 = \mathbf{P}_2 \cdot \mathbf{e}_1', \quad p_4 = \mathbf{P}_2 \cdot \mathbf{e}_2', \quad p_5 = \mathbf{L} \cdot \mathbf{e}_3, \quad p_6 = \mathbf{L} \cdot \mathbf{e}_1' \tag{9.95}
$$

Mit $\mathbf{e}_3 = \sin q_6 \mathbf{e}_2' + \cos q_6 \mathbf{e}_3'$ folgt

$$
\begin{aligned}
\mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{R}_1 &= \cos q_6 (q_1 \mathbf{e}_2' - q_2 \mathbf{e}_1') - q_1 \sin q_6 \mathbf{e}_3' \\
\mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{R}_2 &= \cos q_6 (q_3 \mathbf{e}_2' - q_4 \mathbf{e}_1') - q_3 \sin q_6 \mathbf{e}_3'
\end{aligned}
$$

und entsprechend ergibt sich für die dritte Komponente des Drehimpulses (9.92) der Ausdruck

$$
p_5 = \mathbf{L} \cdot \mathbf{e}_3 = \cos q_6 (q_1 p_2 - q_2 p_1 + q_3 p_4 - q_4 p_3) - \sin q_6 \big(q_1\, \mathbf{e}_3' \cdot \mathbf{P}_1 + q_3\, \mathbf{e}_3' \cdot \mathbf{P}_2\big). \tag{9.96}
$$

Ähnlich findet man für die Projektion des Drehimpulses auf die körperfeste 1-Achse

$$
p_6 = \mathbf{L} \cdot \mathbf{e}_1' = q_2\, \mathbf{e}_3' \cdot \mathbf{P}_1 + q_4\, \mathbf{e}_3' \cdot \mathbf{P}_2. \tag{9.97}
$$

Die letzten beiden Beziehungen können nach den Projektionen $\mathbf{e}_3' \cdot \mathbf{P}_i$ aufgelöst werden. Man findet

$$
\begin{aligned}
\mathbf{e}_3' \cdot \mathbf{P}_1 &= \frac{1}{q_2 q_3 - q_1 q_4}\Big(\frac{q_4}{\sin q_6}\big[(p_1 q_2 - p_2 q_1 + p_3 q_4 - p_4 q_3)\cos q_6 + p_5)\big] + q_3 p_6\Big) \\
\mathbf{e}_3' \cdot \mathbf{P}_2 &= \frac{1}{q_2 q_3 - q_1 q_4}\Big(\frac{q_2}{\sin q_6}\big[(p_2 q_1 - p_1 q_2 + p_4 q_3 - p_3 q_4)\cos q_6 - p_5)\big] - q_1 p_6\Big)
\end{aligned} \tag{9.98}
$$

Nachdem wir die Projektionen der Impulse $\mathbf{P}_1$ und $\mathbf{P}_2$ auf die körperfesten Basisvektoren $\mathbf{e}_a'$ als Funktionen der neuen Koordinaten im Phasenraum berechnet haben, können wir die kinetische Energie in diese Koordinaten umrechnen. Wir finden

$$
H = \Big(\frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_2}\Big)\Big[p_1^2 + p_2^2 + \frac{1}{(q_2 q_3 - q_1 q_4)^2}\big\{(p_1 q_2 - p_2 q_1 + p_3 q_4 - p_4 q_3) q_4 \cot q_6 + \frac{p_5 q_4}{\sin q_6} + p_6 q_3\big\}^2\Big]
$$

$$+ \quad \Big(\frac{1}{2m_2}+\frac{1}{2m_2}\Big)\left[p_3^2+p_4^2+\frac{1}{(q_2q_3-q_1q_4)^2}\Big\{(p_1q_2-p_2q_1+p_3q_4-p_4q_3)q_2\cot q_6+\frac{p_5q_2}{\sin q_6}+p_6q_1\Big\}^2\right]$$

$$+ \quad \frac{1}{m_3}\left[p_1p_3+p_2p_4-\frac{1}{(q_2q_3-q_1q_4)^2}\Big\{(p_1q_2-p_2q_1+p_3q_4-p_4q_3)q_4\cot q_6+\frac{p_5q_4}{\sin q_6}+p_6q_3\Big\}\right.$$

$$\left.\Big\{(p_1q_2-p_2q_1+p_3q_4-p_4q_3)q_2\cot q_6+\frac{p_5q_2}{\sin q_6}+p_6q_1\Big\}\right]$$

$$+ \quad V_{13}\Big(\sqrt{q_1^2+q_2^2}\Big)+V_{23}\Big(\sqrt{q_3^2+q_4^2}\Big)+V_{12}\Big(\sqrt{(q_1-q_3)^2+(q_2-q_4)^2}\Big)$$

Offensichtlich hängt H nicht von q_5 ab und daher ist die Richtung der Knotenlinie eine zyklische Variable. Der kanonisch konjugierte Impuls p_5, d.h. die dritte Komponente des Drehimpulses, ist erhalten. Wir setzen dieses Integral der Bewegung

$$p_5 = L_3 = \text{const.} \tag{9.99}$$

Die Bewegungsgleichungen für q_5 und p_5 dürfen weggelassen werden und wir verbleiben mit einem weiter reduzierten 10-dimensionalen Phasenraum und den Bewegungsgleichungen

$$\dot q_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{und} \quad \dot p_i = -\frac{\partial H}{\partial q_r}, \qquad r = 1,2,3,4,6, \tag{9.100}$$

wobei p_5 in H durch die Konstante L_3 zu ersetzen ist.

Aus der Entwicklung

$$\mathbf{L} = \big(q_2\,\mathbf{e}_3'\cdot\mathbf{P}_1+q_4\,\mathbf{e}_3'\cdot\mathbf{P}_2\big)\mathbf{e}_1' - \big(q_1\,\mathbf{e}_3'\cdot\mathbf{P}_1+q_3\,\mathbf{e}_3'\cdot\mathbf{P}_2\big)\mathbf{e}_2' + \big(p_2q_1-p_1q_2+p_4q_3-p_3q_4\big)\mathbf{e}_3'$$

kann man die Komponenten L_a' des Drehimpulses ablesen und anschließend in die Komponenten L_a umrechnen. Man findet

$$\begin{pmatrix} L_1 \\ L_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k & p_6 \\ p_6 & -k \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sin q_5 \\ \cos q_5 \end{pmatrix}, \quad k = \frac{p_2q_1-p_1q_2+p_4q_3-p_3q_4}{\sin q_6} - L_3\cot q_6. \tag{9.101}$$

Die Werte von L_1 und L_2 hängen von der Wahl des Bezugssystems $(0,\mathbf{e}_a)$ ab. Wir wählen die 3-Achse in Richtung des Drehimpulses, so daß $L_1 = L_2 = 0$ gilt. Die entsprechende $x-y$-Ebene wird *invariable*-Ebene des Systems genannt. Mit dieser Wahl des Koordinatensystems gilt

$$L_3\cos q_6 = p_2q_1-p_1q_2+p_4q_3-p_3q_4 \quad \text{und} \quad p_6 = 0. \tag{9.102}$$

Diese Gleichungen bestimmen q_6 und p_6 als Funktionen der anderen Koordinaten und ersetzen die Bewegungsgleichungen

$$\dot q_6 = \frac{\partial H}{\partial p_6} \quad \text{und} \quad \dot p_6 = -\frac{\partial H}{\partial q_6}.$$

Damit verbleiben wir mit dem System

$$\dot q_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{und} \quad \dot p_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \qquad i = 1,2,3,4, \tag{9.103}$$

mit der HAMILTON-Funktion

$$\begin{aligned}
H &= \left(\frac{1}{2m_1}+\frac{1}{2m_2}\right)\left[p_1^2+p_2^2+\frac{q_4^2}{(q_2q_3-q_1q_4)^2}\left\{(p_1q_2-p_2q_1+p_3q_4-p_4q_3)\cot q_6+\frac{L_3}{\sin q_6}\right\}^2\right] \\
&+ \left(\frac{1}{2m_2}+\frac{1}{2m_2}\right)\left[p_3^2+p_4^2+\frac{q_2^2}{(q_2q_3-q_1q_4)^2}\left\{(p_1q_2-p_2q_1+p_3q_4-p_4q_3)\cot q_6+\frac{L_3}{\sin q_6}\right\}^2\right] \\
&+ \frac{1}{m_3}\left[p_1p_3+p_2p_4-\frac{q_2q_4}{(q_2q_3-q_1q_4)^2}\left\{(p_1q_2-p_2q_1+p_3q_4-p_4q_3)\cot q_6+\frac{L_3}{\sin q_6}\right\}\right. \\
&\qquad\qquad \left.\left\{(p_1q_2-p_2q_1+p_3q_4-p_4q_3)\cot q_6+\frac{L_3}{\sin q_6}\right\}\right] \\
&+ V_{13}\left(\sqrt{q_1^2+q_2^2}\right)+V_{23}\left(\sqrt{q_3^2+q_4^2}\right)+V_{12}\left(\sqrt{(q_1-q_3)^2+(q_2-q_4)^2}\right)
\end{aligned}$$

Nachdem die Ableitungen von H ausgerechnet wurden, kann q_6 gemäß der ersten Gleichung in (9.102) ersetzt werden. Sei nun H' diejenige Funktion, die wir erhalten, wenn wir in H die Koordinate q_6 gemäß der ersten Gleichung in (9.102) ersetzen,

$$H'(q_i,p_i)=H\big(q_i,p_i,q_6(q_i,p_i)\big),\qquad i=1,2,3,4.$$

Dann gilt für irgend eine der Variablen q_i, p_i mit $i=1,2,3,4$

$$\frac{\partial H'}{\partial x}=\frac{\partial H}{\partial x}+\frac{\partial H}{\partial q_6}\frac{\partial q_6}{\partial x}=\frac{\partial H}{\partial x}+p_6\frac{\partial q_6}{\partial x},\qquad x=q^i,p_i,\quad i=1,2,3,4.$$

Aber da $p_6=0$ ist, erhalten wir

$$\dot{q}_i=\frac{\partial H'}{\partial p_i}\quad\text{und}\quad\dot{p}_i=-\frac{\partial H'}{\partial q_i},\qquad i=1,2,3,4, \tag{9.104}$$

wobei die reduzierte HAMILTON-Funktion H' einfacher ist als die HAMILTON-Funktion H,

$$\begin{aligned}
H' &= \left(\frac{1}{2m_1}+\frac{1}{2m_3}\right)(p_1^2+p_2^2)+\left(\frac{1}{2m_2}+\frac{1}{2m_3}\right)(p_3^2+p_4^2)+\frac{1}{m_3}(p_1p_3+p_2p_4) \\
&+ \frac{1}{(q_2q_3-q_1q_4)^2}\left[\left(\frac{1}{2m_1}+\frac{1}{2m_3}\right)q_4^2+\left(\frac{1}{2m_2}+\frac{1}{2m_3}\right)q_2^2-\frac{q_2q_4}{m_3}\right] \\
&\qquad \cdot\left[L_3^2-\big(p_2q_1-p_1q_2+p_4q_3-p_3q_4\big)^2\right] \\
&+ V_{13}\left(\sqrt{q_1^2+q_2^2}\right)+V_{23}\left(\sqrt{q_3^2+q_4^2}\right)+V_{12}\left(\sqrt{(q_1-q_3)^2+(q_2-q_4)^2}\right)
\end{aligned} \tag{9.105}$$

Die Bewegunggleichungen können weiter reduziert werden, wenn man die Energieerhaltung

$$H=\text{const} \tag{9.106}$$

ausnutzt. Dies führt auf einen 6-dimensionalen Unterraum des Phasenraums. Nach heutiger Erkenntnis kann das HAMILTON'sche System von drei Körpern, die über zentrale und konservative Paarkräfte wechselwirken, nicht mehr weiter reduziert werden. Für eine weitergehende Diskussion des 3-Körperproblems und alternative Reduktionen des Systems auf einen 6-dimensionalen Phasenraum verweise ich auf [9].

9.4 Erzeugende Funktionen

Es gibt Rechenvorschriften, welche erlauben, aus sogenannten erzeugenden Funktionen kanonische Transformationen abzuleiten. Der Vorteil liegt darin, daß diese Erzeugenden frei wählbar sind, und es somit möglich ist, einfach auszuprobieren, ob eine gewisse Erzeugende, bzw. die aus ihr abgeleitete kanonische Transformation die Bewegungsgleichungen vereinfacht.

Aus dem Prinzip der kleinsten Wirkung im Phasenraum (9.32) folgt, daß die kanonischen Bewegungsgleichungen bei einer Transformation

$$(q,p) \longrightarrow (Q,P) \tag{9.107}$$

und

$$H(t,q,p) \longrightarrow H'(t,Q,P) \tag{9.108}$$

erhalten bleiben, falls die beiden Funktionale

$$\int dt\Big[\sum_{i=1}^{f} p_i\dot{q}^i - H(t,q,p)\Big] \quad \text{und} \quad \int dt\Big[\sum_{i=1}^{f} P_i\dot{Q}^i - H'(t,Q,P)\Big] \tag{9.109}$$

die gleichen Extremalpunkte haben. Da beim Variieren der Funktionale nur Wege in Γ mit festen Anfangs- und Endorten zugelassen werden, sind die beiden Funktionale in (9.109) bis auf eine Konstante gleich, wenn die Integranden bis auf eine totale Zeitableitung übereinstimmen, d.h. falls

$$\begin{aligned}\sum_i p_i\dot{q}^i - H(t,q,p) &= \sum_i P_i\dot{Q}^i - H'(t,Q,P) + \frac{d}{dt}F(t,q,p,Q,P) \quad \text{oder}\\ \sum_i p_i dq^i - H(t,q,p)dt &= \sum_i P_i dQ^i - H'(t,Q,P)dt + dF(t,q,p,Q,P),\end{aligned} \tag{9.110}$$

gilt. Hierbei ist die *Eichfunktion* F eine beliebige Funktion, die aber wegen (9.107) nur von zwei der vier Variablensätze q,p,Q,P abhängt.

Nach diesen Bemerkungen *definieren* wir nun eine Transformation als *kanonisch*, wenn für eine beliebige HAMILTON-Funktion $H(t,q,p)$ eine HAMILTON-Funktion $H'(t,Q,P)$ existiert mit der Eigenschaft

$$\sum_{i=1}^{f}\Big(p_i dq^i - P_i dQ^i\Big) + \big[H'(t,Q,P) - H(t,q,p)\big]dt = dF(t,q,p,Q,P). \tag{9.111}$$

Die in (9.111) eingeführte Funktion F ist eine beliebige (stetig differenzierbare) Funktion von $4f+1$ Variablen, von denen aber nur $2f+1$ linear unabhängig sind, da die Anzahl Freiheitsgrade des Systems f beträgt und wir für jeden Freiheitsgrad 2 unabhängige Variablen benötigen; die Zeit ist ein zusätzlicher Parameter. Es gibt also - bis auf Linearkombinationen - nur 6 unterschiedliche *erzeugende Funktionen* mit jeweils $2f+1$ unabhängigen Argumenten:

$$F_1(t,q,Q), \quad F_2(t,q,P), \quad F_3(t,p,Q), \quad F_4(t,p,P), \quad F_5(t,q,p), \quad F_6(t,Q,P). \tag{9.112}$$

9.4.1 Die Erzeugende $F_5(t,q,p)$

Die erzeugende Funktion F_5 hängt nur von den konjugierten Variablen (q,p) ab, so daß wir (9.111) wie folgt schreiben können

$$\sum_i \Big(p_i dq^i - P_i dQ^i\Big) + \big[H'(t,Q,P) - H(t,q,p)\big]dt = \sum_i \Big(\frac{\partial F_5}{\partial q^i}dq^i + \frac{\partial F_5}{\partial p_i}dp_i\Big) + \frac{\partial F_5}{\partial t}dt. \tag{9.113}$$

Das totale Differential der Koordinate Q^i können wir umschreiben unter Verwendung ihrer Abhängigkeit von den Variablen (t,q,p),

$$dQ^i = \sum_j \Big(\frac{\partial Q^i}{\partial q^j}dq^j + \frac{\partial Q^i}{\partial p_j}dp_j\Big) + \frac{\partial Q^i}{\partial t}dt$$

und erhalten dann

$$\sum_i \Bigg\{\Big(p_i - \sum_j P_j \frac{\partial Q^j}{\partial q^i} - \frac{\partial F_5}{\partial q^i}\Big)dq^i - \Big(\sum_j P_j \frac{\partial Q^j}{\partial p_i} + \frac{\partial F_5}{\partial p_i}\Big)dp_i\Bigg\} + \Big(H' - H - \sum_j P_j \frac{\partial Q^j}{\partial t} - \frac{\partial F_5}{\partial t}\Big)dt = 0.$$

Nach Voraussetzung sind die q,p und damit auch die dq, dp linear unabhängig und die Koeffizienten von dq^i und dp_i müssen identisch verschwinden. Wir erhalten nach Koeffizientenvergleich

$$\frac{\partial F_5}{\partial q^i} = p_i - \sum_{j=1}^{f} P_j \frac{\partial Q^j}{\partial q^i} \tag{9.114}$$

$$\frac{\partial F_5}{\partial p_i} = -\sum_{j=1}^{f} P_j \frac{\partial Q^j}{\partial p_i} \tag{9.115}$$

$$H' = H + \sum_{j=1}^{f} P_j \frac{\partial Q^j}{\partial t} + \frac{\partial F_5}{\partial t} \tag{9.116}$$

Die Gleichungen (9.114) und (9.115) stellen ein System von $2f$ gekoppelten Gleichungen dar, welches nach den neuen Koordinaten aufzulösen ist. Die gesuchte Hamiltonfunktion $H'(t,Q,P)$ folgt dann aus (9.116) durch Einsetzen der Lösungen $Q(t,q,p)$ und $P(t,q,p)$, wobei die partielle Zeitableitung von F_5 noch beliebig gewählt werden kann. Die Funktion F_5 erzeugt somit unendlich viele kanonische Transformationen. Die Auflösung des gekoppelten Gleichungssystems (9.114,9.115) kann jedoch sehr aufwendig sein, da alle Gleichungen die gesuchten Variablen Q^i und P_i in nichttrivialer Weise enthalten können. Dieser Sachverhalt trifft auch auf die Erzeugende $F_6(t,Q,P)$ zu, da sie ebenfalls eine Funktion von konjugierten Variablen ist.

9.4.2 Die Erzeugende $F_1(t,q,Q)$

Wir untersuchen daher im Folgenden die Funktionen $F_1,\ldots,F_4$ und beginnen mit $F_1(t,q,Q)$. Für eine erzeugende Funktion von q und Q lautet (9.111)

$$\sum_{i=1}^{f} \Big(p_i dq^i - P_i dQ^i\Big) + (H' - H)dt = dF_1(t,q,Q) = \sum_{i=1}^{f} \Big(\frac{\partial F_1}{\partial q^i}dq^i + \frac{\partial F_1}{\partial Q^i}dQ^i\Big) + \frac{\partial F_1}{\partial t}dt. \tag{9.117}$$

Wegen der Unabhängigkeit der dq, dQ und dt erhalten wir durch Koeffizientenvergleich

$$p_i = \frac{\partial F_1(t,q,Q)}{\partial q^i} \tag{9.118}$$

$$P_i = -\frac{\partial F_1(t,q,Q)}{\partial Q^i} \tag{9.119}$$

$$H' = H + \frac{\partial F_1(t,q,Q)}{\partial t}. \tag{9.120}$$

Als Beispiel berechnen wir die von der erzeugenden Funktion $F_1(q,Q) = -Q/q$ auf einem 2-dimensionalen Phasenraum induzierte kanonische Transformation. Nach (9.118) ist

$$p = \frac{\partial F_1}{\partial q} = \frac{Q}{q^2} \quad \text{und damit} \quad Q = q^2 p,$$

und nach (9.119) ist

$$P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} = \frac{1}{q}.$$

Die JACOBI-Matrix dieser Transformation,

$$M = \begin{pmatrix} \partial Q/\partial q & \partial Q/\partial p \\ \partial P/\partial q & \partial P/\partial p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2qp & q^2 \\ -1/q^2 & 0 \end{pmatrix},$$

ist eine symplektische Matrix, $M^T J M = J$, wie es für eine kanonische Transformation sein muß.

Umgekehrt kann man aus einer bekannten Transformation, zum Beispiel aus

$$Q = \log p \quad \text{und} \quad P = -qp \tag{9.121}$$

mit symplektischer JACOBI-Matrix die Erzeugende F_1 berechnen. Mit $p = \exp(Q)$ führt die allgemeine Beziehung (9.118) auf folgende Formel für F_1:

$$F_1(t,q,Q) = \int p(q,Q)dq + g(t,Q) = e^Q q + g(t,Q).$$

Mit (9.119) erhalten wir weiterhin

$$P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} = -qe^Q - \frac{\partial g(t,Q)}{\partial Q} \overset{(9.121)}{=} -qp \overset{p=\exp(Q)}{=} -e^Q q$$

woraus unmittelbar folgt $\partial g(t,Q)/\partial Q = 0$. Damit ist die Erzeugende

$$F_1 = q \exp(Q) \tag{9.122}$$

bis auf eine unbedeutende Konstante bestimmt.

Die allgemeine Vorgehensweise zur Berechnung der kanonischen Transformationen ist wie folgt: Bei gegebenen $F_1(t,q,Q)$ berechnet man zunächst die f Bewegungsgleichungen für die p_i durch Differenziation der Erzeugenden nach den q^i, Gl. (9.118), und löst die Gleichungen nach den $Q^i(t,q,p)$ auf. Danach berechnet man die Ableitungen von F_1 formal nach den Q^i und setzt die berechneten $Q^i(t,q,p)$ in den gewonnenen Ausdruck für die P_i ein, woraus sich die neuen Impulse $P_i(t,q,p)$ ergeben.

9.4.3 Die Erzeugende $F_2(t, q, P)$

Wir beginnen zunächst mit einer Funktion $F_2'(t, q, P)$, die von den gleichen Variablen abhängt wie die später zu definierende Funktion F_2. Eine Transformation $(q, p) \to (Q, P)$ ist dann kanonisch, wenn

$$\sum_{i=1}^{f} \Big(p_i dq^i - P_i dQ^i \Big) + (H' - H) dt = dF_2'(t, q, P) = \sum_{i=1}^{f} \Big(\frac{\partial F_2'}{\partial q^i} dq^i + \frac{\partial F_2'}{\partial P^i} dP^i \Big) + \frac{\partial F_2'}{\partial t} dt \tag{9.123}$$

gilt. Wegen der Abhängigkeit $Q^i(t, q, P)$ der neuen Koordinaten von den q^i und P_i folgt

$$dQ^i = \sum_j \Big(\frac{\partial Q^i}{\partial q^j} dq^j + \frac{\partial Q^i}{\partial P_j} dP_j \Big) + \frac{\partial Q^i}{\partial t} dt.$$

Dies setzen wir in (9.123) ein und vergleichen die Koeffizienten, da die Differentiale dq^i, dP_i und dt unabhängig sind. Der Vergleich liefert

$$\begin{aligned}
p_i &= \sum_j P_j \frac{\partial Q^j}{\partial q^i} + \frac{\partial F_2'}{\partial q^i} = \frac{\partial}{\partial q^i} \Big(F_2' + \sum_j P_j Q^j \Big) \\
0 &= \sum_j P_j \frac{\partial Q^j}{\partial P_i} + \frac{\partial F_2'}{\partial P_i} = \frac{\partial}{\partial P_i} \Big(F_2' + \sum_j P_j Q^j \Big) - Q^i \\
H' &= H + \sum_j P_j \frac{\partial Q^j}{\partial t} + \frac{\partial F_2'}{\partial t} = H + \frac{\partial}{\partial t} \Big(F_2' + \sum_j P_j Q^j \Big),
\end{aligned}$$

wobei wir mehrfach die Unabhängigkeit der Variablen (q, P, t) benutzten. Dies Gleichungen führen uns ganz natürlich auf die Definition

$$F_2(t, q, P) = F_2'(t, q, P) + \sum P_j Q^j. \tag{9.124}$$

Damit lassen sich die Gleichungen in kompakter Form schreiben,

$$p_i = \frac{\partial F_2(t, q, P)}{\partial q^i} \tag{9.125}$$

$$Q^i = \frac{\partial F_2(t, q, P)}{\partial P_i} \tag{9.126}$$

$$H' = H + \frac{\partial F_2(t, q, P)}{\partial t}, \tag{9.127}$$

Als Beispiel wollen wir wieder die Erzeugende F_2 für die Transformation (9.121) berechnen. Mit $p = -P/q$ erhalten wir durch Integration von (9.125)

$$F_2(q, P) = \int p(P, q) dq + g(P) = -P \log q + g(P)$$

mit einer beliebigen, stetig differenzierbaren Funktion $g(P)$. Wir nutzen nun (9.126) um $g(P)$ zu bestimmen:

$$Q = \log p = \frac{\partial F_2}{\partial P} = -\log q + \frac{\partial g(P)}{\partial P}.$$

Wir lösen nach $\partial g/\partial P$ auf und integrieren über P,

$$g(P) = \int \log(qp) dP = \int \log(-P) dP = P \log(-P) - P.$$

Damit erhalten wir die Erzeugende

$$F_2(q,P) = -P \log q + P \log(-P) - P = P\big[\log(-P/q) - 1\big]. \tag{9.128}$$

9.4.4 Zusammenhang zwischen den Erzeugenden

Wir wollen eine Beziehung zwischen denjenigen Erzeugenden $F_1(t,q,Q)$ und $F_2(t,q,P)$ herstellen, die zur selben kanonischen Transformation Anlaß geben. Zum Beispiel, was ist der Zusammenhang zwischen den Erzeugenden

$$F_1(q,Q)) = q \exp(Q) \quad \text{und} \quad F_2(q,P) = P\big[\log(-P/q) - 1\big] \tag{9.129}$$

in (9.122) und (9.128), die zur gleichen kanonischen Transformation (9.121) gehören? Aus den Definitionsgleichungen (9.117) und (9.123) folgt sofort

$$d(F_1 - F_2') = 0 \quad \text{oder} \quad F_1 = F_2' + \text{const}, \tag{9.130}$$

wobei die Konstante als 0 angenommen werden kann. Mit (9.124) erhalten wir unter Benutzung von (9.119) die Beziehung

$$F_2(t,q,P) = F_2'(t,q,P) + \sum_{i=1}^{f} P_i Q^i \stackrel{(9.119)}{=} F_1(t,q,Q) - \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial F_1}{\partial Q^i} Q^i \tag{9.131}$$

Dabei sind die Beziehungen (9.119), also

$$P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q^i} \tag{9.132}$$

nach den Q^i aufzulösen und rechts in (9.131) einzusetzen. Damit ist die erzeugende Funktion $F_2(t,q,P)$ die Legendre-Transformierte von $F_1(t,q,Q)$.

9.4.5 Die Erzeugenden im Überblick

Analog findet man, daß auch die Erzeugenden F_3 und F_4 sich als Legendre-Transformierte und Legendre-Doppeltransformierte von F_1 ergeben:

$$
\begin{aligned}
F_3(t,p,Q) &= F_1(t,q,Q) - \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial F_1}{\partial q^i} q^i, & p_i &= \frac{\partial F_1}{\partial q^i} \\
F_4(t,p,P) &= F_1(t,q,Q) - \sum_{i=1}^{f} \Big(\frac{\partial F_1}{\partial q^i} q^i + \frac{\partial F_1}{\partial Q^i} Q^i \Big), & p_i &= \frac{\partial F_1}{\partial q^i}, \quad P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q^i}.
\end{aligned} \tag{9.133}
$$

Dabei sind bei der Transformation $F_1 \to F_3$ die Gleichungen $p_i = \partial F_1/\partial q^i$ nach den q^i aufzulösen und bei der Transformation $F_1 \to F_4$ die Gleichungen $p_i = \partial F_1/\partial q^i$ und $P_i = -\partial F_1/\partial Q^i$ nach den q^i und Q^i aufzulösen.

Die aus den Forderung (9.111) durch Koeffizientenvergleich folgenden Verknüpfungen sind in der folgenden Tabelle zusammengefaßt:

Übersicht			
Erzeugende	Ableitungen		Einfacher Fall
$F_1(t,q,Q)$	$p = +\partial F_1/\partial q$	$P = -\partial F_1/\partial Q$	$F_1 = qQ, \quad Q = +p, \quad P = -q$
$F_2(t,q,P)$	$p = +\partial F_2/\partial q$	$Q = +\partial F_2/\partial P$	$F_2 = qP, \quad Q = +q, \quad P = +p$
$F_3(t,p,Q)$	$q = -\partial F_3/\partial p$	$P = -\partial F_3/\partial Q$	$F_3 = pQ, \quad Q = -q, \quad P = -p$
$F_4(t,p,P)$	$q = -\partial F_4/\partial p$	$Q = +\partial F_4/\partial P$	$F_4 = pP, \quad Q = +p, \quad P = -q$

Die neue HAMILTON-Funktion berechnet sich gemäß

$$
H'(t,Q,P) = H(t,q,p) + \frac{\partial F_i}{\partial t} \tag{9.134}
$$

aus der alten. Für zeitunabhängige, d.h. eingeschränkte kanonische Transformationen ist die HAMILTON-Funktion selbst eine sogenannte *kanonische Invariante*, d.h. $H' = H$. Als kanonische Invarianten bezeichnen wir Größen, welche sich bei kanonischen Transformationen nicht ändern. Zum Beispiel ist die Formulierung der Dynamik mit Hilfe der POISSON-Klammern bei zeitunabhängigen Transformationen kanonisch invariant. In der Tat gilt sogar der

Satz: *Eine (zeitabhängige) Transformation*

$$
Q^i = Q^i(t,q,p) \quad \text{und} \quad P_i = P_i(t,q,p) \tag{9.135}
$$

ist genau dann kanonisch, wenn die fundamentalen POISSON-*Klammern in den neuen Variablen erfüllt sind, d.h.*

$$
\{Q^i, Q^j\} = 0 = \{P_i, P_j\}, \qquad \{Q^i, P_j\} = \delta^i{}_j. \tag{9.136}
$$

Dieser Satz kann hilfreich sein um zu überprüfen, ob eine gegebene Transformation kanonisch ist.

Dreikörperproblem: Eine Erzeugende, welche die kanonische Transformation (9.93) und (9.95) beim *Dreikörperproblem* induziert, ist

$$F_3(q^i, P_i) = -\mathbf{P}_1 \cdot R(\mathbf{e}_3, q_5)R(\mathbf{e}_1, q_6)\begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ 0 \end{pmatrix} - \mathbf{P}_2 \cdot R(\mathbf{e}_3, q_5)R(\mathbf{e}_1, q_6)\begin{pmatrix} q_3 \\ q_4 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{9.137}$$

Polarkoordinaten: Die kanonische Transformation

$$(\underbrace{x, y}_{q}, \underbrace{p_x, p_y}_{p}) \longrightarrow (\underbrace{r, \varphi}_{Q}, \underbrace{p_r, p_\varphi}_{P}) \tag{9.138}$$

wird von der Funktion $F_3(r, \varphi, p_x, p_y) = -r(p_x \cos\varphi + p_y \sin\varphi)$ erzeugt. Man findet folgende bekannte Beziehung zwischen kartesischen und Polarkoordinaten,

$$x = -\frac{\partial F_3}{\partial p_x} = r\cos\varphi \quad \text{und} \quad y = -\frac{\partial F_3}{\partial p_y} = r\sin\varphi \tag{9.139}$$

und zwischen den entsprechenden konjugierten Impulsen,

$$p_r = -\frac{\partial F_3}{\partial r} = p_x\cos\varphi + p_y\sin\varphi \quad \text{und} \quad p_\varphi = -\frac{\partial F_3}{\partial\varphi} = -p_x r\sin\varphi + p_y r\cos\varphi. \tag{9.140}$$

Diese Gleichungen kann man nach den alten Impulsen auflösen und erhält

$$p_x = p_r\cos\varphi - \frac{1}{r}p_\varphi\sin\varphi \quad \text{und} \quad p_y = p_r\sin\varphi + \frac{1}{r}p_\varphi\cos\varphi. \tag{9.141}$$

Wir haben also auf ungewöhnliche Art Polarkoordinaten eingeführt.

9.5 Theorem von Liouville

Das Theorem von LIOUVILLE bietet eine eleganten Einstieg in die *statistische Mechanik*. Um den Zustand eines mechanischen Systems als Punkt im Phasenraum Γ festlegen zu können, muß man die Anfangsbedingung $(q^1, \ldots, q^f, p_1, \ldots, p_f)$ zur Lösung der kanonischen Gleichungen exakt kennen, was für makroskopische Systeme von etwa $N \sim 10^{23}$ Teilchen *praktisch* unmöglich ist. Hinzu kommt, daß es für solch komplizierte Systeme illusorisch wäre, die Lösungen der Bewegungsgleichungen explizit zu berechnen[5]. Als eine weniger genaue, aber für viele wichtige Fragen durchaus genügende Zustandsbeschreibung, bietet sich dann die Angabe der *Wahrscheinlichkeit* $\rho(t, q, p) = \rho(t, x)$ an, mit der das System sich zur Zeit t am Punkt $x = (q, p) \in \Gamma$ befindet. Etwas genauer: Ist $\Delta \subset \Gamma$ ein Gebiet im Phasenraum, dann ist

$$w(\Delta) = \int_\Delta d^fq\, d^fp\; \rho(t, q, p) = \int_\Delta d^{2f}x\; \rho(t, x), \qquad d^{2f}x \;= d^fq\, d^fp \;= \prod_{i=1}^{f} dq^i dp_i, \tag{9.142}$$

die Wahrscheinlichkeit dafür, das System zur Zeit t im Gebiet Δ zu finden. Insbesondere werden wir die Normierungsbedingung

[5] Die besten numerischen Codes bewältigen einige Millionen Teilchen.

$$w(\Gamma) = \int_\Gamma d^{2f}x \; \rho(t,x) = 1 \tag{9.143}$$

verlangen müssen. Kennt man ρ, so kann man den *Erwartungswert* einer Observablen $F : \Gamma \to \mathbb{R}$ als Mittelwert berechnen,

$$\langle F \rangle = \int d^{2f}x \; \rho(t,x) F(t,x). \tag{9.144}$$

Wenn die mittlere quadratische Abweichung $(\Delta F)^2 = \langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2$ genügend klein ist, so kann man den Mittelwert (9.144) mit dem makroskopischen Meßwert identifizieren.

In der statistischen Physik entspricht der Wahrscheinlichkeitdichte ρ ein *Ensemble:* Man ersetzt das tatsächliche System, dessen Anfangsbedingungen man nur ungenau (unvollständig) kennt, oder dessen genaue Anfangsbedingungen irrelevant sind, durch einen großen Satz gleichartiger Systeme (durch ein Ensemble) mit derselben HAMILTON-Funktion $H(q,p)$ aber mit verschiedenen, jeweils genau spezifizierten Anfangsbedingungen, in Einklang mit den makroskopischen Kenntnissen über das tatsächliche System. Jedes Mitglied des Ensemble wird durch einen Punkt in Γ repräsentiert, das Ensemble also durch eine Ansammlung von Punkten in Γ, deren Verteilung durch die Punktschwarmdichte (Wahrscheinlichkeitsdichte) ρ gegeben ist.

Nun ändern sich alle Systeme (repräsentiert durch Punkte im Phasenraum) gemäß den Bewegungsgleichungen, die Punkte im Phasenraum bewegen sich. Dadurch verändert sich die anfängliche[6] Punktschwarmdichte $\rho\big(0, x(0)\big)$ zu $\rho\big(t, x(t)\big)$. Es stellt sich die Frage, welcher Bewegungsgleichung die Punktschwarmdichte ρ genügt. Hierzu betrachten wir ein Gebiet Δ im Phasenraum und die Wahrscheinlichkeit dafür, daß zur Zeit 0 ein System des Ensembles in Δ liegt,

$$w(\Delta) = \int_\Delta d^{2f}x \; \rho(0,x). \tag{9.145}$$

Die Trajektorien jedes einzelnen Systems genügen den kanonischen Gleichungen mit den Anfangsbedingungen

$$x(0) = x_0. \tag{9.146}$$

Durch die zeitliche Entwicklung erreichen die Punkte in Δ neue Stellen $x(t)$. Insgesamt gesehen wird dadurch Δ zur Zeit 0 in eine neue Untermenge Δ_t zur Zeit t überführt. Die Wahrscheinlichkeit, daß im Ensemble zur Zeit t der Punktschwarm in Δ_t liegt, ist

$$w(\Delta_t) = \int_{\Delta_t} d^{2f}x \; \rho(t,x). \tag{9.147}$$

Der LIOUVILLE'sche Satz besagt nun, daß die beiden Wahrscheinlichkeiten (9.145) und (9.147) gleich sind, da keine Schwarmpunkte im Phasenraum Γ erzeugt oder vernichtet werden,

$$\int_\Delta d^{2f}x_0 \; \rho(0,x_0) = \int_{\Delta_t} d^{2f}x \; \rho(t,x). \tag{9.148}$$

Wir wollen aus dieser Bedingung eine Differentialgleichung für die Schwarmdichte ableiten.

[6] Als Anfangszeit wählen wir $t_0 = 0$.

Als Vorbereitung betrachten wir den Fluß des HAMILTON'schen Vektorfeldes $X_H = J\nabla_x H$,

$$\Gamma \ni x_0 \longrightarrow x = x(t, x_0) \in \Gamma, \qquad x(0, x_0) = x_0, \quad \dot{x}(t, x_0) = X_H\big(x(t, x_0)\big), \tag{9.149}$$

und zeigen, daß für jede feste Zeit die Abbildung $x(t, .) : \Gamma \to \Gamma$ kanonisch ist. Wir müssen also zeigen, daß die JACOBI-Matrix

$$M_{\alpha\beta} = \Big(\frac{\partial x_\alpha(t, x_0)}{\partial x_{0\beta}}\Big) \tag{9.150}$$

für alle t symplektisch ist. Für $t = 0$ ist $x = x_0$ und entsprechend ist $x(0, .)$ die identische Abbildung, welche natürlich symplektisch ist. Die zeitliche Variation der Matrixelemente $M_{\alpha\beta}$ ist

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial x_\alpha}{\partial x_{0\beta}} = \frac{\partial}{\partial x_{0\beta}}\dot{x}_\alpha = \frac{\partial}{\partial x_{0\beta}} J_{\alpha\sigma}\frac{\partial H}{\partial x_\sigma} = J_{\alpha\sigma}\frac{\partial^2 H}{\partial x_\sigma \partial x_\rho}\frac{\partial x_\rho}{\partial x_{0\beta}}$$

und lautet in Matrixform

$$\frac{d}{dt}M = JH''M \quad \text{mit} \quad H'' = \Big(\frac{\partial^2 H}{\partial x^\alpha \partial x^\beta}\Big) = (H'')^T. \tag{9.151}$$

Es folgt, daß $M^T JM$ zeitunabhängig ist,

$$\frac{d}{dt}\big(M^T JM\big) \overset{(9.151)}{=} (M^T H'' J^T)JM + M^T J(JH''M) = M^T H'' M - M^T H'' M = 0,$$

wobei wir die Symmetrie von H'' und die Eigenschaften $J^2 = -\mathbb{1}$ sowie $J^T J = \mathbb{1}$ der symplektischen Metrik ausnutzten. Damit gilt

$$(M^T JM)(t) = (M^T JM)(0) = J, \tag{9.152}$$

d.h. die JACOBI-Matrix des Flusses ist eine symplektische Matrix, was zu zeigen war. Der Fluß zu X_H ist damit eine kanonische Abbildung. Insbesondere ist die Determinante der JACOBI-Matrix des HAMILTON'schen Flusses gleich Eins, $\det M = 1$. Es dann folgt sofort, daß

$$\int_{\Delta_t} d^{2f}x\ \rho(t, x) = \int_\Delta d^{2f}x_0\ \rho\big(t, x(t, x_0)\big) \det\Big(\frac{\partial x_\alpha(t, x)}{\partial x_{0\beta}}\Big) = \int_\Delta d^{2f}x_0\ \rho\big(t, x(t, x_0)\big) \tag{9.153}$$

gilt, und insbesondere auch

$$V(\Delta_t) = \int_{\Delta_t} d^{2f}x\ = \int_\Delta d^{2f}x_0 = V(\Delta). \tag{9.154}$$

Das Volumen eines beliebigen Gebietes im Phasenraum bleibt erhalten, wenn sich die Punkte seiner Begrenzung entsprechend den HAMILTON-Gleichungen bewegen. Der Fluß im Phasenraum entspricht demnach dem einer *inkompressiblen Flüssigkeit*. Der Grund für die Inkompressibilität des Flußes ist die Quellenfreiheit des HAMILTON'schen Vektorfeldes,

$$\mathrm{div} X_H = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} J_{\alpha\beta}\frac{\partial H}{\partial x_\beta} = 0. \tag{9.155}$$

Der HAMILTON'sche Fluß hat also weder Quellen noch Senken.

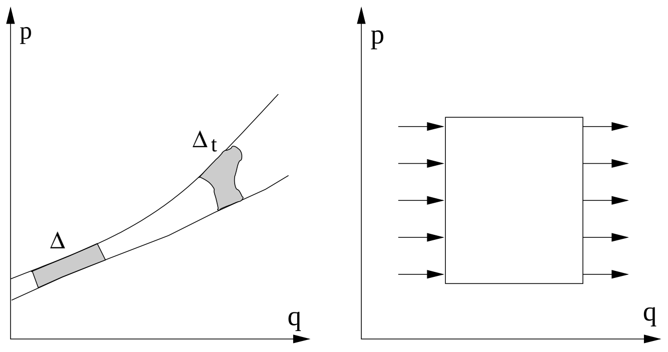

Abbildung 9.5: *Links: Entwicklung eines Gebietes in Γ. Das Volumen von Δ ist gleich demjenigen von Δ_t. Rechts: Der Fluß ist inkompressibel.*

Zur Illustration betrachten wir wieder einmal den harmonischen Oszillator mit Masse m und Kreisfrequenz ω. Die Trajektorien im Phasenraum wurden im Abschnitt (3.3.2) berechnet,

$$\begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\omega t & -m\omega\sin\omega t \\ \sin\omega t/m\omega & \cos\omega t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_0 \\ p_0 \end{pmatrix} = M(t) \begin{pmatrix} q_0 \\ p_0 \end{pmatrix}.$$

Sie beschreiben Ellipsen und sind in der Abbildung (3.9) dargestellt. Man sieht leicht, daß M eine symplektische Matrix ist. In der folgenden Abbildung sieht man das Bild des Rechtecks auf der rechten Seite nach einem Achtel und einem Viertel der Periode des Oszillators. Einzelne Punkte bewegen sich auf Ellipsen. Dies ist für einige Punkte in der Figur angedeutet. Der zur Zeit $t = 0$ beinahe quadratische Bereich wird bei der Bewegung aller seiner Punkte wie angedeutet verzerrt.

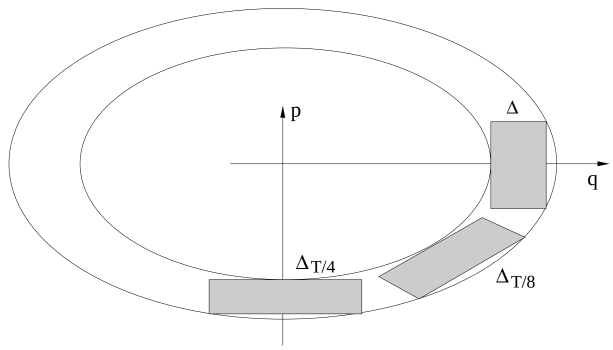

Abbildung 9.6: *Der* HAMILTON*'sche Fluß des harmonischen Oszillators im Phasenraum .*

Mit diesen Vorbereitungen sind wir nun in der Lage die Gleichung für die zeitliche Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte ρ abzuleiten. Benutzen wir nämlich (9.153) in (9.148) dann folgt

$$\int_\Delta d^{2f}x_0\ \rho(0, x_0) = \int_\Delta d^{2f}x_0\ \rho\big(t, x(t, x_0)\big) \tag{9.156}$$

für alle Zeiten. Wir leiten nach der Zeit ab und finden, da die linke Seite zeitunabhängig ist,

$$0 = \frac{d}{dt}\int_\Delta d^{2f}x_0\rho\big(t, x(t, x_0)\big) = \int_\Delta d^{2f}x_0\ \frac{d}{dt}\rho\big(t, x(t, x_0)\big) = \int_\Delta d^{2f}x_0\ \Big(\frac{\partial\rho}{\partial t} + \{\rho, H\}\Big).$$

Diese Gleichung muß für beliebige Untermengen Δ des Phasenraumes gelten, und es folgt die LIOUVILLE-*Gleichung*

$$\frac{d\rho}{dt} = \{\rho, H\} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \tag{9.157}$$

Sie gibt an, wie sich die Wahrscheinlichkeitsdichte an einem festen Punkt im Phasenraum ändert: die Änderung ist proportional zur POISSON-Klammer der Dichte mit der HAMILTON-Funktion.

Zur Erläuterung dieser wichtigen Gleichung schreiben wir sie um. Mit

$$\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\big(\rho \dot{x}_\alpha\big) = \frac{\partial \rho}{\partial x_\alpha} J_{\alpha\beta} \frac{\partial H}{\partial x_\beta} + \rho \underbrace{J_{\alpha\beta} \frac{\partial^2 H}{\partial x_\alpha \partial x_\beta}}_{=0} = \frac{\partial \rho}{\partial x_\alpha} J_{\alpha\beta} \frac{\partial H}{\partial x_\beta} = \{\rho, H\}$$

kann die LIOUVILLE-Gleichung (9.157) auch als *Kontinuitätsgleichung im Phasenraum* verstanden werden,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div}\big(\rho\, \dot{x}\big) = 0 \quad \text{mit} \quad \dot{x} = \begin{pmatrix} \dot{q}^i \\ \dot{p}_i \end{pmatrix} \tag{9.158}$$

als Geschwindigkeit im Phasenraum. Das LIOUVILLE-Theorem läßt sich dann - analog zur Ladungserhaltung in der Elektrodynamik - als Erhaltung der Zahl der das Ensemble repräsentierenden Punkte im Phasenraum interpretieren: Nach (9.158) kann sich diese Zahl in einem Bereich Δ im Phasenraum nur dadurch ändern, daß Punkte des Schwarms hinein- bzw. herauswandern.

Von besonderem Interesse für die Gleichgewichtsthermodynamik sind stationäre Verteilungen,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \tag{9.159}$$

Für eine stationäre Verteilung gilt

$$\{\rho, H\} = 0. \tag{9.160}$$

Eine wichtige Lösung dieser Gleichung ist

$$\rho = \delta(H - E), \tag{9.161}$$

was als *mikrokanonisches Ensemble* bezeichnet wird, bei dem die Gesamtenergie des Systems genau bekannt ist. Da dieses ρ nur von der HAMILTON-Funktion abhängt, ist nach der Produktregel für die POISSON-Klammern die Gleichung (9.160) offensichtlich erfüllt.

Falls nur der Mittelwert der Energie $\langle H \rangle$ aufgrund der Wechselwirkung mit einem *'Wärmereservoir'* bekannt ist, wird ρ zu

$$\rho \sim \exp\big(-H/kT\big), \tag{9.162}$$

was als *kanonisches Ensemble* bezeichnet wird. Hier kann T dann mit der makroskopischen Temperatur des Systems identifiziert werden, während k die BOLTZMANN-Konstante bezeichnet.

Daneben treten in der statistischen Physik noch weitere Ensemblen auf, die jeweils dadurch charakterisiert werden, ob eine thermodynamische Observable *exakt* oder *im Mittel* erhalten ist.

Zu den verschiedenen Ensemblen gehören thermodynamische Potentiale, die durch LEGENDRE-Transformationen auseinander hervorgehen.

9.6 Elementare Hamilton-Jacobi Theorie

Die Koordinaten $x(t) = \big(q(t), p(t)\big)$ im Phasenraum charakterisieren den Zustand des Systems zu einem Zeitpunkt $t = t_0$ vollständig. Ist $x(t_0)$ bekannt, so kann die Bewegungsgleichung mit diesem Anfangspunkt eindeutig gelöst werden. Im folgenden wählen wir $t_0 = 0$.

Wie wir im letzten Abschnitt gesehen haben, läßt sich der Zusammenhang von $x(t)$ und $x(0)$ als eine spezielle, explizit *zeitabhängige* kanonische Transformation auffassen,

$$\begin{aligned} q(t) &\longrightarrow Q\big(t, q(t), p(t)\big) = Q \\ p(t) &\longrightarrow P\big(t, q(t), p(t)\big) = P. \end{aligned} \tag{9.163}$$

mit der Umkehrung

$$\begin{aligned} Q &\longrightarrow q(t, Q, P) = q(t) \\ P &\longrightarrow p(t, Q, P) = p(t). \end{aligned} \tag{9.164}$$

Wenn Q und P konstant sind, dann darf die transformierte HAMILTON-Funktion $H'(t, Q, P)$ weder von Q noch von P abhängen. Mit Hilfe einer Erzeugenden, die explizit von der Zeit abhängt, können wir sogar $H' = 0$ erreichen. Unter einer kanonischen Transformation mit Erzeugenden F transformiert die HAMILTON-Funktion gemäß

$$H \longrightarrow H' = H + \frac{\partial F}{\partial t}. \tag{9.165}$$

Die eigentliche Aufgabe besteht jetzt also darin, eine geeignete Erzeugende der gesuchten kanonischen Transformation zu finden, also derjenigen Transformation, welche das zeitlich veränderliche $x(t)$ auf seinen Anfangswert $x(0)$ zurückführt.

9.6.1 Die Prinzipalfunktion $F_2(t, q, P)$

Wir wählen eine Erzeugende vom Typ F_2, d.h. ein $F_2(t, q, P)$. Dann ist

$$p_i = \frac{\partial F_2(t, q, P)}{\partial q^i} \quad \text{und} \quad Q^i = \frac{\partial F_2(t, q, P)}{\partial P_i}. \tag{9.166}$$

Dies setzen wir in den Ausdruck für die transformierte HAMILTON-Funktion $H'(t, Q, P)$ ein, die ja identisch verschwinden soll:

$$H'(t, Q, P) = H(t, q, p) + \frac{\partial F_2(t, q, P)}{\partial t} = H\Big(t, q, \frac{\partial F_2}{\partial q}\Big) + \frac{\partial F_2}{\partial t} \stackrel{!}{=} 0. \tag{9.167}$$

Wir erhalten also eine nichtlineare partielle Differentialgleichung für F_2, die sogenannte HAMILTON-JACOBI-*Gleichung*

$$H\Big(t, q^1, \ldots, q^f, \frac{\partial F_2}{\partial q^1}, \ldots, \frac{\partial F_2}{\partial q^f}\Big) + \frac{\partial F_2}{\partial t} = 0. \tag{9.168}$$

Die Lösungen sind Funktionen der $f+1$ Variablen $(t, q^1, \ldots, q^f)$ und hängen von $f+1$ frei wählbaren Integrationskonstanten $\alpha_1, \ldots, \alpha_{f+1}$ ab. Da in (9.166) nur Ableitungen von F_2 vorkommen, ist eine dieser Konstanten rein additiv, $F_2 = F_2(t, q, \alpha_1, \ldots, \alpha_f) + \alpha_{f+1}$. Die additive Konstante α_{f+1} ist nicht interessant und kann Null gesetzt werden. Es bleiben f Integrationskonstanten übrig. Wir wählen eine solche Darstellung der Lösung, daß die Konstanten gerade die (konstanten) kanonischen Impulse P_i sind. Die so gewonnene Funktion F_2 nennt man *Prinzipalfunktion* oder auch HAMILTON'*sche Wirkungsfunktion*. Man benutzt für sie traditionell den Buchstaben S, d.h.

$$F_2 = S(t, q^1, \ldots, q^f, \alpha_1, \ldots, \alpha_f). \tag{9.169}$$

Nun wollen wir einen Lösungsweg der HAMILTON-JACOBI-Gleichung betrachten. Wir gehen von der Gleichung (9.167) aus

$$H\Big(t, q, \frac{\partial S}{\partial q}\Big) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0, \qquad S = S(t, q, P), \tag{9.170}$$

d.h. S soll gerade so bestimmt werden, daß $H'(t, Q, P) = 0$ gilt und die neuen Orte und Impulse damit zeitunabhängig werden,

$$\dot{Q}^i = 0, \qquad i = 1, \ldots, f \tag{9.171}$$

$$\dot{P}_i = 0, \qquad i = 1, \ldots, f. \tag{9.172}$$

Üblicherweise bezeichnet man die Konstanten $\alpha_i \equiv P_i(t) = P_i(0)$. Wenn man die HAMILTON-JACOBI-Gleichung gelöst hat, dann löst man die Beziehungen

$$Q^i = \frac{\partial S(t, q, P)}{\partial P_i} = \text{const} \tag{9.173}$$

nach den $q^i(t)$ auf, d.h. man erhält $q^i(t)$ als Funktion der Anfangswerte Q^i und P_i. Die $p_i(t)$ ergeben sich aus

$$p_i = \frac{\partial S(t, q, P)}{\partial q^i}, \tag{9.174}$$

wobei die $q^i(t)$ entsprechend dem vorherigen Schritt durch Q und P und t ausgedrückt werden.

Die Erzeugende $S(t, q, P)$ als Lösung der zeitabhängigen HAMILTON-JACOBI-Gleichung läßt sich physikalisch interpretieren. Hierzu betrachten wir deren totale Zeitableitung, die mit der LAGRANGE-Funktion identifiziert werden kann:

$$\frac{dS(t, q, P)}{dt} = \sum_{i=1}^{f} \Big(\frac{\partial S}{\partial q^i}\dot{q}^i + \frac{\partial S}{\partial P_i}\dot{P}_i\Big) + \frac{\partial S}{\partial t} \overset{(9.174, 9.172, 9.170)}{=} \sum_{i=1}^{f} p_i \dot{q}^i - H = L. \tag{9.175}$$

Die Integration von (9.175) zeigt, daß die Erzeugende $S(t, q, P)$ bis auf eine Integrationskonstante die Wirkung entlang einer Bahnkurve darstellt. Deshalb wird sie häufig auch als HAMILTON*sche Wirkungsfunktion* bezeichnet.

Es stellt sich die Frage: Wie kann man die HAMILTON-JACOBI-Gleichung lösen? Zunächst betrachten wir ein abgeschlossenes System mit $H = H(q,p)$. Wir fordern

$$H(q,p) = -\frac{\partial S}{\partial t}. \tag{9.176}$$

Diese Gleichung wird gelöst durch den Ansatz

$$S(t,q,P) = W(q,P) - H'(P)t. \tag{9.177}$$

Hier ist H' die Separationskonstante, die den konstanten Wert der HAMILTON-Funktion $H(q,p)$ hat. Bei einem konservativen System ist sie gleich der Energie. Die Funktion $W(q,p)$ heißt *charakteristische Funktion*. Sie gehorcht der *zeitunabhängigen* HAMILTON-JACOBI-Gleichung

$$H\Big(q, \frac{\partial W}{\partial q}\Big) = H'(P). \tag{9.178}$$

Die Transformationsgleichungen (9.173) und (9.174) lauten

$$Q^i = \frac{\partial W(q,P)}{\partial P_i} - \frac{\partial H'(P)}{\partial P_i} t, \qquad i = 1,\ldots,f \tag{9.179}$$

$$p_i = \frac{\partial W(q,P)}{\partial q^i}. \qquad i = 1,\ldots,f. \tag{9.180}$$

Es gibt keinen leicht überschaubaren Satz von Bedingungen dafür, daß sich diese Gleichung (9.178) leicht[7] lösen läßt.

Auch die charakteristische Funktion $W(q,P)$ hat eine physikalische Bedeutung, die derjenigen der Wirkungsfunktion $S(t,q,P)$ sehr ähnlich ist. Für die totale Zeitableitung erhalten wir

$$\frac{dW(q,P)}{dt} = \sum_{i=1}^{f} \Big(\frac{\partial W}{\partial q^i}\dot{q}^i + \frac{\partial W}{\partial P_i}\dot{P}_i \Big) \overset{(9.172,(9.180))}{=} \sum_{i=1}^{f} p_i \dot{q}^i, \tag{9.181}$$

so daß die Zeitintegration ergibt

$$W(q,P) = \int \sum_{i=1}^{f} p_i \dot{q}^i dt = \sum_{i=1}^{f} \int p_i dq^i. \tag{9.182}$$

9.6.2 Beispiele

Nichtwechselwirkende 1-dimensionale Systeme: Das Verfahren von HAMILTON und JACOBI zur Lösung mechanischer Probleme scheint auf den ersten Blick nur von geringer praktischer Bedeutung zu sein. Anstatt der $2f$ gewöhnlichen HAMILTON-Gleichungen muß man die partielle HAMILTON-JACOBI-Gleichung lösen und nichtlineare partielle Differentialgleichungen sind im Allgemeinen schwerer zu lösen als gewöhnliche Differentialgleichungen. Unter gewissen Bedingungen ist es jedoch möglich, die einzelnen Variablen in der HAMILTON-JACOBI-Gleichung zu separieren,

[7] Was immer das heißt.

so daß die Lösung stets auf Quadraturen zurückgeführt werden kann. Praktisch ist das HAMILTON-JACOBI-Verfahren nur dann von Nutzen, wenn sich eine solche Separation erreichen läßt.

Eine Separation der Variablen ist zum Beispiel möglich, wenn die HAMILTON-Funktion eine Summe von Hamiltonfunktionen $H_i(q^i, p_i)$ ist, die jeweils nur von einer Koordinate und dem zugehörigen konjugierten Impuls abhängen,

$$H(q,p) = \sum_i H_i(q^i, p_i). \tag{9.183}$$

Durch den Separationsansatz,

$$W(q,P) = \sum_i W_i(q^i, P) \tag{9.184}$$

erhält man dann ungekoppelte Gleichungen für jedes q^i. Wichtig dabei ist, daß die einzelnen W_i von *allen* P_j abhängen können, also nicht nur von P_i abhängen. Setzen wir unseren Separationsansatz in (9.178) ein und benutzen (9.181), so erhalten wir

$$\sum_i H_i\Big(q^i, \frac{\partial W_i}{\partial q^i}\Big) = H'(P). \tag{9.185}$$

Wir greifen einen beliebigen Term in der Summe heraus, z.B. denjenigen mit $i = j$,

$$H_j\Big(q^j, \frac{\partial W_j}{\partial q^j}\Big) = H'(P) - \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{f} H_i\Big(q^i, \frac{\partial W_i}{\partial q^i}\Big).$$

Die beiden Seiten hängen von verschiedenen Variablen ab und müssen daher konstant sein. Wir nennen diese Konstanten jeweils $h_j(P)$. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit können wir die einzelnen Separationskonstanten $h_j(P)$ mit den neuen Impulsen identifizieren,

$$h_i(P) = P_i, \qquad i = 1, \ldots, f. \tag{9.186}$$

wobei deren Summe gemäß (9.185) die Energie des Systems ergibt,

$$H'(P) = \sum_{i=1}^{f} P_i. \tag{9.187}$$

Damit ergeben sich die entkoppelten Differentialgleichungen

$$H_i\Big(q^i, \frac{\partial W_i(q^i, P)}{\partial q^i}\Big) = P_i \quad \text{mit} \quad \sum_{i=1}^{f} P_i = H'(P). \tag{9.188}$$

Diese f Differentialgleichungen hängen jeweils nur von einer Ortskoordinate ab, wohl aber von allen Konstanten P_i.

Beispiel: Eindimensionale Potentialprobleme. Wir untersuchen die HAMILTON-JACOBI-Gleichung für das eindimensionale Potentialproblem mit HAMILTON-Funktion

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q). \tag{9.189}$$

Da die HAMILTON-Funktion nicht explizit von der Zeit abhängt läßt sich die Zeitabhängigkeit abseparieren. Die entsprechende zeitunabhängige HAMILTON-JACOBI-Differentialgleichung für die Prinzipalfunktion lautet

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W}{\partial q}\right)^2 + V(q) = H'(P), \tag{9.190}$$

wobei die Separationskonstante $H'(P)$ als Energie des Systems mit dem neuen Impuls als Erhaltungsgröße identifiziert wurde. Wir setzen $H'(P) = P$. Für eindimensionale Systeme ist die HAMILTON-JACOBI-Gleichung eine gewöhnliche Differentialgleichung und läßt sich lösen,

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial q} = \sqrt{2m[P - V(q)]} \Longrightarrow W(q) &= \int \sqrt{2m[P - V(q)]}dq \\ S &= \int \sqrt{2m[P - V(q)]}dq - Pt. \end{aligned} \tag{9.191}$$

Die Ableitung dieser Erzeugenden Funktion nach dem neuen Impuls liefert die neue Koordinate

$$Q = \frac{\partial S}{\partial P} = \int \frac{m dq}{\sqrt{2m\left[P - V(q)\right]}} - t \tag{9.192}$$

und ableiten nach der alten Koordinate den alten Impuls,

$$p = \frac{\partial S}{\partial q} = \sqrt{2m[P - V(q)]}. \tag{9.193}$$

Hierbei sind Q und P Integrationskonstanten. Auflösen der Gleichungen (9.192) und (9.193) nach den alten Koordinaten und Impulsen ergibt dann die Lösung der Bewegungsgleichungen.

Für den *harmonischen Oszillator* mit

$$V = \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$$

ist diese Auflösung sogar analytisch möglich. Das Integral (9.192) findet sich in jeder besseren Formelsammlung[8]

$$Q = \frac{1}{\omega}\arcsin\left(q\sqrt{\frac{m\omega^2}{2P}}\right) - t. \tag{9.194}$$

Wir können jetzt leicht nach der alten Koordinate q auflösen,

$$q = \sqrt{\frac{2P}{m\omega^2}}\sin(\omega t + \omega Q). \tag{9.195}$$

Für p in (9.193) erhalten wir dann

[8]z.B. in Bronstein.

$$p=\sqrt{2mP-2mP\sin^2(\omega t+\omega Q)}=\sqrt{2mP}\cos(\omega t+\omega Q). \tag{9.196}$$

Die Funktionen $q(t)$ und $p(t)$ in (9.195) und (9.196) beschreiben Bahnen des harmonischen Oszillators im Phasenraum. Dabei sind die Integrationskonstanten Q und P proportional zur Phase und Amplitude der Schwingungen des Oszillators.

9.6.3 Wirkungs- und Winkelvariablen

Bisher wurde die charakteristische Funktion $W(q,P)$ nur als Bestandteil der HAMILTON'schen Wirkungsfunktion $S(t,q,P)$ betrachtet. Wir können aber $W(q,P)$ als Erzeugende einer eigenen, zeitunabhängigen kanonischen Transformation auffassen. Es folgt mit (9.165) und (9.178), daß die neue HAMILTON-Funktion folgende Form hat

$$H'(Q,P)=H\Big(q,\frac{\partial W(q,P)}{\partial q^i}\Big)+\underbrace{\frac{\partial W(q,P)}{\partial t}}_{=0}=H'(P_1,\dots,P_f), \tag{9.197}$$

so daß die verallgemeinerten Koordinaten Q^i zyklisch sind. Die neuen kanonischen Gleichungen

$$\dot{Q}^i=\frac{\partial H'(P)}{\partial P_i}\quad \text{und}\quad \dot{P}_i=-\frac{\partial H'(P)}{\partial Q^i}=0 \tag{9.198}$$

lassen sich unmittelbar integrieren

$$Q^i(t)=\frac{\partial H'}{\partial P_i}\,t+Q^i,\qquad P_i(t)=P_i,\qquad i=1,\dots,f. \tag{9.199}$$

Die zu den zyklischen Koordinaten Q^i kanonisch konjugierten Impulse sind Erhaltungsgrößen. Damit haben wir eine kanonische Transformation auf *Wirkungs- und Winkelvariablen* gefunden. Diese werden häufig über die Diskussion (zeitlich oder räumlich) periodischer Bewegungen eingeführt. Derartige Bewegungen lassen sich als Bewegungen auf Kreisen oder höherdimensionalen Tori darstellen. Die Winkelvariablen, für die man in der Regel den Buchstaben θ benutzt, entsprechen Polarwinkeln. Die Wirkungsvariablen, die man üblicherweise mit J bezeichnet, entsprechen den von den Bahnen im Phasenraum eingeschlossenen Flächen. Wesentlich ist, daß die transformierte HAMILTON-Funktion $H'(\theta,J)$ nicht mehr von den Winkelvariablen abhängt, $H'=H'(J)$. Daher sind in (9.197) die neuen Koordinaten Q^i Winkelvariablen und die neuen Impulse P_i Wirkungsvariablen. Die Bewegungsgleichungen für die Wirkungsvariablen lauten

$$\dot{J}_i=-\frac{\partial H'}{\partial \theta^i}=0\Longrightarrow J_i=J_i(0)=\text{const.} \tag{9.200}$$

Für die θ^i erhalten wir zunächst

$$\dot{\theta}^i=\frac{\partial H'}{\partial J_i}\equiv\omega_i. \tag{9.201}$$

Da die J_i aber zeitlich konstant sind, sind auch die ω_i zeitlich konstant. Damit wird

$$\theta^i(t) = \omega_i(J)\,t + \theta^i(0). \tag{9.202}$$

Die Bewegung ist also durch $2f$ Konstanten, die J_i und die $\theta^i(0)$, charakterisiert. Eine HAMILTON-Funktion, für die sich eine Transformation auf Wirkung- und Winkelvariable finden läßt, nennt man *integrabel*. Anstelle von integrabel verwendet man auch die Bezeichnung *lösbar*.

Integrabel sind zum Beispiel

- alle Systeme mit nur einem Freiheitsgrad und hinreichend oft differenzierbarer HAMILTON-Funktion,
- alle System mit linearen Bewegungsgleichungen,
- alle nichtlinearen Systeme, die sich auf entkoppelte Systeme mit einem Freiheitsgrad transformieren lassen,
- die Systeme, die in vielen Lehrbüchern als Übungsaufgaben gegeben werden, und für die explizite Lösungen gefunden werden sollen.

Im nächsten Semester wird eine Vorlesung Mechanik II gelesen, in der allgemeinere dynamische Systeme behandelt werden. Trotz der Schönheit und Eleganz der HAMILTON'schen Mechanik sollte man nicht vergessen, daß diese nur für reibungsfreie Systeme gilt. In der Menge der makroskopischen Systeme, deren Bewegung sich durch die Wirkung von Kräften beschreiben läßt, stellen die HAMILTON'schen Systeme eine kleine Teilmenge dar. Die moderne Theorie der dynamischen Systeme ist viel umfassender als die HAMILTON'sche Theorie. Anderseits ist Reibung ein Begriff, der in wirklich fundamentalen Theorien der Physik keinen Platz hat. Alle fundamentalen Wechselwirkungen der Physik, also Elektrodynamik, schwache und starke Wechselwirkung und die Gravitation, sind reibungsfrei und passen wunderbar in das Gebäude der HAMILTON'schen Mechanik.

In dieser Vorlesung wurde die *relativistische Mechanik* nicht behandelt. Dies wurde nur teilweise aus Zeitgründen unterlassen. An unserer Fakultät werden regelmäßig Wahlvorlesungen über spezielle Relativitätstheorie gelesen, in denen die relativistische Mechanik einen breiten Raum einnimmt.

Literaturverzeichnis

[1] P. Strathern, *Archimedes & der Hebel*, Fischer Taschenbuch Verlag, Frankfurt, 1999.

[2] J. Hoppe, *Johannes Kepler*, Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1976.

[3] P. Strathern, *Newton & die Schwerkraft*, Fischer Taschenbuch Verlag, Frankfurt, 1998; R.S. Westfall, *Isaac Newton. Eine Biographie*, Spektrum, Heidelberg, 1996.

[4] C. Seelig, *Albert Einstein. Leben und Werk eines Genies unserer Zeit*, Zürich 1960; A. Pais, *Raffiniert ist der Herrgott ...*, Braunschweig 1986; A. Fölsing, *Albert Einstein*, Frankfurt/Main 1993.

[5] E.T. Whittaker and G.N. Watson, *A Course in Modern Analysis*, 4th edition, CUP, 1990; F. Tölke, *Praktische Funktionenlehre*, vierter Band: *Elliptische Integralgruppen und Jacobi elliptische Funktionen im Komplexen*, Springer, Berlin, 1967

[6] F. Klein und A. Sommerfeld, *Über die Theorie des Kreisels*, Teubner, Leipzig, 1910;
V. Golubev, *Lectures on Integration of the Equations of Motion of a Rigid Body about a Fixed Point*, State Publ. House of Theoretical Technical Litarature, Moskau, 1953;
K. Magnus, *Kreisel: Theorie und Anwendungen*, Springer Verlag, 1971;
E.T. Whittacker, *A Treatise on the analytical dynamics of paricles and rigid bodies*, Cambridge University Press, 1993;
E. Leimanis, *The General Problem of the Motion of Coupled Rigid Bodies about a Fixed Point*, Springer Verlag, 1965;
M. Audin, *Spinning Tops*, Cambridge University Press, 1966;
H. Dullin, *Die Energieflächen des Kowalewskaja-Kreisels*, Dissertation, Bremen, 1994;
D. Lewis, T. Ratiu, J. Simon und J. Marsden, *The heavy top: a geometric treatment*, Nonlinearity **5** (1992) 1-48

[7] E. Klingbeil, *Variatonsrechnung*, BI-Wiss.-Verlag, Mannheim, Zürich, 1988
U. Brechtken-Manderscheid, *Einführung in die Variationsrechnung*, Wiss. Buchgesellschaft, Darmstadt, 1983

[8] J.E. Marsden und T.S. Ratiu, *Einführung in die Mechanik und Symmetrie*, Springer, 2000.

[9] E.T. Whittaker, *A Treatise on the Analytical Dynamics of Particles and Rigid Bodies*, 4. Ausgabe, Cambridge University Press, 1993.