11 Aspekte kanonischer Transformationen

An vielen Beispielen haben wir gesehen, dass konkrete Probleme durch geschickte Wahl der Koordinaten technisch stark vereinfacht werden können. Im Lagrange-Formalismus kommt uns dabei zugute, dass die Euler-Lagrange-Gleichungen forminvariant unter dem Wechsel von Koordinaten vom Typ

$$q_i \rightarrow Q_i(q,t) \tag{11.1}$$

sind, d.h. mit

$$0 = \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \tag{11.2a}$$

gilt ebenfalls

$$0 = \frac{\partial L}{\partial Q_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_i}, \tag{11.2b}$$

wobei in (11.2b) $L = L(q,\dot{q};t)$ mit (11.1) als

$$L = L(q(Q,t),\, \dot{q}(Q,\dot{Q},t);t) =: L(Q,\dot{Q};t) \tag{11.3}$$

aufgefasst werden muss.

Im kanonischen Formalismus ist (11.1) ein Beispiel für Punkttransformationen. Es ist leicht nachzuweisen, dass auch die Hamilton-Gleichungen unter Punkttransformationen forminvariant sind. Dazu leiten wir aus (11.3) den neuen kanonischen Impuls P_i ab:

$$P_i = \frac{\partial L(Q,\dot{Q};t)}{\partial \dot{Q}_i} \tag{11.4}$$

Nach Invertierung von (11.4) können wir die Geschwindigkeit $\dot{Q}$ als Funktion von Q, P und t auffassen:

$$\dot{Q} = \dot{Q}(Q,P;t), \tag{11.5}$$

so dass sich die neue Hamilton-Funktion konstruieren lässt:

$$K(Q,P;t) := \sum_{i=1}^{n} P_i \dot{Q}_i(Q,P;t) - L(Q,\dot{Q}(Q,P;t);t) \tag{11.6}$$

Hier haben wir einen neuen Buchstaben "K" verwendet, um deutlich zu machen, dass K eine völlig andere Abhängigkeit von Q und P (und t) aufweisen kann als H von q und p (und t). Dennoch folgen analog zu Kapitel 9 unmittelbar die kanonischen Bewegungsgleichungen

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i}, \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} \tag{11.7}$$

Da im kanonischen Formalismus Orte und Impulse gleich-behandelt werden, erscheint (11.1) als künstliche Einschränkung. In völliger Allgemeinheit würden wir erweiterte Transformationen der Orte und Impulse betrachten wollen:

$$q \to Q(q,p;t) \qquad (11.8)$$
$$p \to P(q,p;t)$$

Allerdings zeigt sich, dass die kanonischen Bewegungsgleichungen nicht forminvariant unter beliebigen <u>Phasenraumtransformationen</u> (11.8) sind. D.h. i. A. führt (11.8) nicht zu einer neuen Hamilton-Funktion $K(Q,P;t)$, die im neuen Variablensatz die kanonischen Bewegungsgleichungen erfüllt.

Alle Transformationen (11.8) für die (für beliebiges $H(q,p;t)$) eine neue Hamiltonfunktion $K(Q,P;t)$ existiert (mit forminvarianten Bewegungsgleichungen), heißen "<u>kanonisch</u> im weiteren Sinn".

Aus dem Hamiltonschen-Prinzip lässt sich ein Kriterium für solche Transformationen herleiten:

Eine Transformation (11.8) ist genau dann kanonisch im weiteren Sinn, wenn aus dem Hamiltonschen Prinzip

$$0 = \delta \int_{t_1}^{t_2} dt\, L = \delta \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\sum_i p_i \dot{q}_i - H(q, p, t) \right) \qquad (11.9)$$

für alle Hamiltonfunktionen H folgt, dass

$$0 = \delta \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\sum_i P_i \dot{Q}_i - K(Q, P, t) \right) \qquad (11.10)$$

(11.10) zusammen mit (11.8) und (11.9) ist als implizite Konstruktionsvorschrift der neuen Hamiltonfunktion K zu lesen.

Die notwendige und hinreichende Bedingung dafür, dass (11.10) aus (11.8 & 9) folgt, ist, dass sich die Integranden um eine totale Ableitung und ggf. um einen Faktor unterscheiden:

$$\sum_i p_i \dot{q}_i - H = c \left(\sum_i P_i \dot{Q}_i - K \right) + \frac{d}{dt} \hat{F}(q, p, Q, P, t) \qquad (11.11)$$

Durch eine Punkttransformation vom Typ

$$Q \to c\, Q \;, \quad P \to P \;, \quad K \to c\, K(c^{-1} Q, P, t) \qquad (11.12)$$

lässt sich der Faktor immer auf $c = 1$ transformieren. Er enthält somit keine weitere Information. Somit erhalten wir die implizite Konstruktionsvorschrift von

Kanonischen Transformationen "im engeren Sinn"

bzw. einfach nur Kanonischen Transformationen, wenn gilt

$$\left(\sum_i p_i \dot{q}_i - H\right) - \left(\sum_i P_i \dot{Q}_i - K\right) = \frac{d}{dt} \hat{F}(q, p, Q, P; t)$$

(11.13)

Die Größe $\hat{F}$ ist neben der Zeit t von den $2n$ alten Variablen q und p und von den $2n$ neuen Variablen Q und P, also insgesamt von $4n$ Variablen neben der Zeit abhängig. Allerdings werden diese $4n$ Variablen durch die $2n$ Gleichungen der Transformation (11.8) verknüpft, so dass $\hat{F}$ nur von $2n$ unabhängigen Variablen abhängen kann. Man klassifiziert die kanonischen Transformationen nun nach der Wahl dieser expliziten Abhängigkeiten:

$$\hat{F}_1(q, Q; t), \quad \hat{F}_2(q, P; t), \quad \hat{F}_3(p, Q; t), \quad \hat{F}_4(p, P; t).$$

(11.14)

Diese Funktionen heißen "Erzeugende" der kanonischen Transformation. Wir wollen uns im Folgenden beispielhaft eine Transformation mit $\hat{F}_2(q, P; t)$ genauer anschauen

Wir betrachten dazu (11.13) und sehen q und P als unabhängige Variable an (z.B. nachdem (11.8) so aufgelöst wird, dass sich Q und p als Funktionen von q und P schreiben lassen.) Wir beginnen mit (11.13):

$$\sum_i \left(p_i \dot{q}_i - P_i \dot{Q}_i \right) - H + K = \frac{d}{dt} \hat{F}_2 (q, P, t) \,. \qquad (11.15)$$

Mit $\dot{Q}_i = \frac{d}{dt} Q_i (q, P, t)$ folgt

$$\sum_i \left[p_i \dot{q}_i - P_i \sum_j \left(\frac{\partial Q_i}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial Q_i}{\partial P_j} \dot{P}_j \right) - P_i \frac{\partial Q_i}{\partial t} \right] - H + K$$

$$= \sum_i \left(\frac{\partial \hat{F}_2}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \hat{F}_2}{\partial P_i} \dot{P}_i \right) + \frac{\partial \hat{F}_2}{\partial t} \qquad (11.16)$$

Wegen der Unabhängigkeit von q und P muss diese Gleichung jeweils für alle Koeffizienten von $\dot{q}_i$ und $\dot{P}_i$ und für die übrigen (nur q und P abhängigen) Terme separat erfüllt sein. Wir erhalten:

$$\dot{q}_i : \qquad p_i = \sum_j P_j \frac{\partial Q_j}{\partial q_i} + \frac{\partial \hat{F}_2}{\partial q_i} = \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\hat{F}_2 + \sum_j P_j Q_j \right)$$

$$\dot{P}_i : \qquad 0 = \sum_j P_j \frac{\partial Q_j}{\partial P_i} + \frac{\partial \hat{F}_2}{\partial P_i} = \frac{\partial}{\partial P_i} \left(\hat{F}_2 + \sum_j P_j Q_j \right) - Q_i$$

$$K = H + \sum_i P_i \frac{\partial Q_i}{\partial t} + \frac{\partial \hat{F}_2}{\partial t} = H + \frac{\partial}{\partial t} \left(\hat{F}_2 + \sum_j P_j Q_j \right)$$

(11.17)

Es ist zweckmässig, die Größe

$$F_2(q,P,t) = \hat{F}_2(q,P,t) + \sum_{j=1}^{M} P_j Q_j(q,P,t) \quad (11.18)$$

zu definieren. Damit gelten die einfachen Gleichungen

$$p_i = \frac{\partial F_2(q,P,t)}{\partial q_i} \quad (11.19a)$$

$$Q_i = \frac{\partial F_2(q,P,t)}{\partial P_i} \quad (11.19b)$$

$$K = H + \frac{\partial F_2}{\partial t} \quad (11.19c)$$

Damit ist eine Transformation (11.8) bei der die $2n$ Variablen q_i, P_i unabhängig sind, genau dann kanonisch, wenn eine Erzeugende $F_2(q,P,t)$ existiert, die die Gleichungen (11.19a & b) erfüllt.

Die neue Hamilton-Funktion K ist dann genau durch (11.19c) definiert und entsprechend direkt konstruierbar.

(NB: die Fälle $\hat{F}_1, \hat{F}_3, \hat{F}_4$ können analog diskutiert werden. Es zeigt sich, dass alle Erzeugenden durch

Legendre-Transformationen miteinander verknüpft sind.)

Als einfaches Beispiel betrachten wir Transformationen mit

$$F_2(q, P; t) = \sum_j f_j(q;t)\, P_j \qquad (11.20a)$$

aus (11.19b) erhalten wir direkt die neuen Orte

$$Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = f_i(q;t) \; . \qquad (11.20b)$$

Die Erzeugende vom Typ (11.20a) entspricht somit der Erzeugenden von Punkttransformationen vom Typ (11.1). Alle Punkttransformationen sind somit kanonisch.

Der Zusammenhang zwischen alten und neuen Impulsen muss nicht über die Lagrange-Funktion konstruiert werden, sondern folgt direkt aus (11.19a):

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} = \sum_j \frac{\partial f_j(q;t)}{\partial q_i} P_j \; . \qquad (11.20c)$$

Bereits im Lagrange-Formalismus haben wir gesehen, dass günstige Koordinaten Probleme erheblich vereinfachen können. Z.B. im Fall von zyklischen Koordinaten folgte, dass der zugehörige kanonische Impuls eine Erhaltungsgröße ist. Dies ist auch im Hamilton-Formalismus sichtbar:

Hängt $L(q, \dot{q}; t)$ nicht von q ab: $L = L(\dot{q}; t)$, so hängt auch

$$H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L(\dot{q}; t) = H(p) \qquad (11.21a)$$

nicht von q ab und es folgt mit

$$\dot{p} = -\frac{\partial H(p)}{\partial q} = 0 \quad , \qquad (11.21b)$$

dass der zugehörige Impuls eine Erhaltungsgröße ist.

Im Hamilton-Formalismus gilt dies in gleicher Weise für den Fall, dass die Hamilton-Funktion nicht vom Impuls abhängt:

$$\dot{q} = \frac{\partial H(q, t)}{\partial p} = 0 \quad \Rightarrow \quad q = \text{const.} \qquad (11.21c)$$

Dies schlägt vor, Probleme dadurch zu vereinfachen, dass man kanonische Transformationen findet, die die Abhängigkeiten der neuen Hamiltonfunktion K von den neuen Orten und Impulsen Q und P reduziert, so dass man möglichst viele Erhaltungsgrößen findet.

Der "Idealfall" wäre somit eine kanonische Transformation dergestalt, dass die neuen Orte und Impulse

$$q_i(t) \rightarrow Q_i(q(t), p(t); t) = \text{const}$$
$$p_i(t) \rightarrow P(q(t), p(t); t) = \text{const} \qquad (11.22)$$

allesamt Konstanten der Bewegung sind.

Dieser Fall ist sicherlich erfüllt, wenn die neue Hamilton-Funktion K identisch verschwindet,

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} = 0 \quad , \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} = 0 \qquad (11.23)$$

Somit benötigen wir eine Erzeugende F_2, die die neue Hamiltonfunktion K auf Null transformiert:

$$0 = K = H(q, p; t) + \frac{\partial F_2(q, P; t)}{\partial t} \qquad (11.24)$$

Die rechte Seite scheint von $3n$ Variablen abzuhängen. Allerdings können wir, wenn wir q und P als unabhängig betrachten p aus (11.19a) berechnen:

$$p_i = \frac{\partial F_2(q, P; t)}{\partial q_i} \qquad (11.25)$$

Wir erhalten somit die Bestimmungsgleichung für die gesuchte Transformation F_2 :

$$H\left(q_1, \dots q_n, \frac{\partial F_2}{\partial q_1}, \dots \frac{\partial F_2}{\partial q_n}; t\right) + \frac{\partial F_2}{\partial t} = 0 \qquad (11.26)$$

Dies ist die Hamilton-Jacobi-Gleichung. Da die Impulse p_i i.A. mindestens quadratisch auftreten, ist dies i.A. eine nicht-lineare partielle Differentialgleichung erster Ordnung in den Variablen $q_1, \dots q_n, t$ für die Erzeugende $F_2(q_i P_i t)$ auf konstante neue Orte Q und Impulse P.

Historisch wurden die vollständigen Lösungen nicht mit $F_2(q_i P_i t)$ sondern mit

$$S(q_1, \dots q_n, \alpha_1, \dots \alpha_n; t) \qquad (11.27)$$

und als Prinzipalfunktion oder als Hamiltonsche Wirkungsfunktion bezeichnet. Die konstanten Impulse P werden durch die Konstanten $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ parametrisiert, die sich aus den Anfangsbedingungen ergeben müssen. Die "Gebrauchsanweisung" für die Hamilton-Jacobi Theorie lautet somit

- Stelle die Hamilton-Funktion $H(q,p;t)$ auf.
- Ersetze $p_i \to \frac{\partial S}{\partial q_i}$ und löse

$$H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}; t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \qquad (11.28)$$

- Da auch die neuen Orte $Q_i \to \beta_i$ Konstanten sind

$$Q_i \to \beta_i = \frac{\partial S(q,\alpha;t)}{\partial \alpha_i}, \qquad (11.29)$$

die mit den Anfangsbedingungen verknüpft sind, erhält man die Lösungen für die Trajektorien $q(t)$ aus Inversion von (11.29)

$$q_i = q_i(\alpha, \beta; t) \qquad (11.30)$$

- Die Impulse folgen direkt aus

$$p_i = \frac{\partial S(q,\alpha;t)}{\partial q_i} \qquad (11.31)$$

Für bisher in der Vorlesung betrachtete einfache Probleme ist die Hamilton-Jacobi-Theorie vergleichsweise aufwendig und somit wenig nützlich.
Technisch weit überlegen ist sie, wenn die partielle DGl. (11.28) in allen Variablen separierbar ist.
Beispielsweise baut eine zweckmäßige Störungstheorie in der Himmelsmechanik auf der Hamilton-Jacobi-Theorie auf.
Schließlich hat die Gleichung in bestimmten Fällen Ähnlichkeit mit der Eikonalgleichung der Strahlenoptik, die 1926 E. Schrödinger zur Aufstellung der zeitabhängigen Schrödingergleichung inspirierte.