Kapitel 7

Hamiltonsche Mechanik

7.1 Das Hamiltonsche Prinzip

- Wir werden zeigen:

  Die Lagrange-Gleichungen II. Art sind die sogenannten *Euler-Lagrange-Gleichungen* des Variationsproblems

$$S = S\{q_A\} = \int_{t_1}^{t_2} L(q_A, \dot{q}_A, t)\,\mathrm{d}t \overset{!}{=} \text{stationär} \tag{7.1}$$

- Hierbei ist S das durch (7.1) definierte sogenannte *Wirkungsfunktional* mit der Lagrange-Funktion $L = L(q_A, \dot{q}_A, t)$ als Integrand:

  - Jeder Bahnkurve $q_A = q_A(t)$ ($t \in [t_1, t_2]$) im Konfigurationsraum aller N_F generalisierten Koordinaten (d.h. $A = 1, \ldots, N_F$) wird durch (7.1) eine reelle Zahl zugeordnet.
  - Betrachtet werden dabei nur Bahnen mit gleichen, festgehaltenen Anfangs- und Endpunkten,

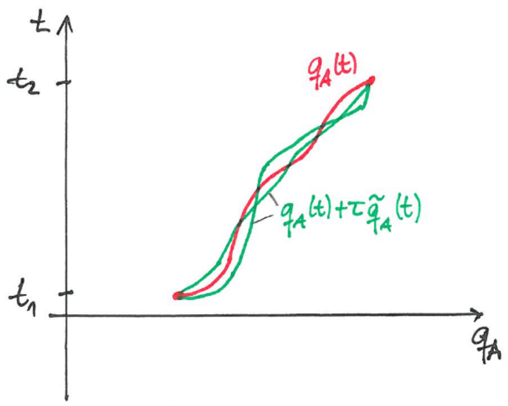
$$q_A(t_1) = q_{A(1)}, \qquad q_A(t_2) = q_{A(2)} \tag{7.2}$$

- *Stationarität*:

  Die Bahnkurve $q_A(t)$ heißt stationärer Punkt des Funktionals S, falls für alle Funktionen $\tilde{q}_A : [t_1, t_2] \to \mathbb{R}$ mit $\tilde{q}_A(t_1) = \tilde{q}_A(t_2) = 0$ die Funktion

$$\phi_{\tilde{q}_A} = \phi_{\tilde{q}_A}(\tau) := S\{q_A + \tau \tilde{q}_A\}, \qquad \tau \in \mathbb{R}$$

  am Punkt $\tau = 0$ stationär ist, d.h. falls gilt: $\left.\dfrac{\mathrm{d}\phi_{\tilde{q}_A}}{\mathrm{d}\tau}\right|_{\tau=0} = 0.$



Erläuterung:

- Bei gegebenen Funktionen $\tilde{q}_A$ stellen $q_A + \tau\tilde{q}_A$ für $\tau \in \mathbb{R}$ benachbarte Vergleichsbahnen dar.
- Stationarität heißt, dass eine beliebige infinitesimale Abweichung von der Bahn $q_A(t)$ bei festgehaltenen Endpunkten [siehe (7.2)] den Wert S des Funktionals in erster Ordnung bezüglich τ nicht ändert.
- Extremwerte: In der Variationsrechnung wird oft das Extremum eines Integralausdruckes gesucht. In Analogie zur Analysis im $\mathbb{R}^n$ (dort verschwindet der Gradient der Funktion am Extremwertpunkt) sind die Extrema von Integralfunktionalen stationäre Punkte (notwendige Bedingung).

- *Hamilton-Prinzip der stationären Wirkung:*

  Die wirkliche, von einem mechanischen System durchlaufene Bahnkurve $q_A = q_A(t)$ ist ein stationärer Punkt des Wirkungsfunktionals S, das durch (7.1) gegeben ist.

- *Ableitung der „Euler-Lagrangeschen" Differentialgleichungen:*

  - Wir betrachten:

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\phi_{\tilde{q}_A}}{\mathrm{d}\tau} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\int_{t_1}^{t_2} L(q_A + \tau\tilde{q}_A, \dot{q}_A + \tau\dot{\tilde{q}}_A, t)\,\mathrm{d}t \\ &= \sum_{B=1}^{N_F}\int_{t_1}^{t_2}\left[\tilde{q}_B \frac{\partial L}{\partial q_B}\bigg|_{(q_A+\tau\tilde{q}_A,\dot{q}_A+\tau\dot{\tilde{q}}_A,t)} + \dot{\tilde{q}}_B \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_B}\bigg|_{(q_A+\tau\tilde{q}_A,\dot{q}_A+\tau\dot{\tilde{q}}_A,t)}\right]\mathrm{d}t\end{aligned}$$

– Den zweiten Term integrieren wir partiell:

$$\dot{u} = \dot{\tilde{q}}_B, \quad u = \tilde{q}_B, \qquad v = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_B}, \quad \dot{v} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_B}:$$

$$\int_{t_1}^{t_2} \dot{\tilde{q}}_B \left.\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_B}\right|_{(q_A+\tau\tilde{q}_A, \dot{q}_A+\tau\dot{\tilde{q}}_A, t)} \mathrm{d}t$$

$$= \left[\tilde{q}_B \left.\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_B}\right|_{(q_A+\tau\tilde{q}_A, \dot{q}_A+\tau\dot{\tilde{q}}_A, t)}\right]_{t_1}^{t_2} - \int\limits_{t_1}^{t_2} \tilde{q}_B \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left.\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_B}\right|_{(q_A+\tau\tilde{q}_A, \dot{q}_A+\tau\dot{\tilde{q}}_A, t)} \mathrm{d}t$$

– Der erste Term verschwindet wegen $\tilde{q}_B(t_1) = \tilde{q}_B(t_2) = 0$. Wir erhalten:

$$\frac{\mathrm{d}\phi_{\tilde{q}_A}}{\mathrm{d}\tau} = \sum_{B=1}^{N_F} \int\limits_{t_1}^{t_2} \tilde{q}_B \left[\left.\frac{\partial L}{\partial q_B}\right|_{(q_A+\tau\tilde{q}_A, \dot{q}_A+\tau\dot{\tilde{q}}_A, t)} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left.\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_B}\right|_{(q_A+\tau\tilde{q}_A, \dot{q}_A+\tau\dot{\tilde{q}}_A, t)}\right] \mathrm{d}t$$

– Definitionsgemäß verschwindet dieser Ausdruck für beliebige Funktionen $\tilde{q}_A : [t_1, t_2] \to \mathbb{R}$ mit $\tilde{q}_A(t_1) = \tilde{q}_A(t_2) = 0$ an der Stelle $\tau = 0$.

– Dies kann aber nur gewährleistet werden, wenn der Klammerausdruck für alle B verschwindet.

– Somit erfüllen stationäre Punkte q_A des Wirkungsfunktionals S die *Euler-Lagrangeschen* Differentialgleichungen:

$$\frac{\partial L}{\partial q_B} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_B} = 0,$$

die mit den Lagrange-Gleichungen II. Art übereinstimmen.

• Diskussion:

  – In der Physik wird nicht untersucht, ob der stationäre Punkt des Wirkungsintegrals einem Extremum oder eher einem Sattelpunkt entspricht.

  – Sehr viele wichtige Gleichungen der Physik lassen sich als Euler-Lagrange-Gleichungen eines Variationsproblems für ein zugehöriges *Wirkungsfunktional* ableiten.

– Insbesondere werden in der modernen Quantenfeldtheorie die Feldgleichungen auf diese Weise mittels einer *Lagrangedichte* bestimmt.

– Ein Wirkungsprinzip ist die kürzeste („stenogrammhafte") Zusammenfassung von Naturgesetzen.

7.2 Generalisierte Impulse, Hamilton-Funktion und kanonische Gleichungen

- In den kartesischen Koordinaten x^i eines IS $\mathcal{S}$ lautet die Lagrange-Funktion für N freie Teilchen unter dem Einfluss eingeprägter Kräfte (mit Potential):

$$L = \sum_{i=1}^{3} \sum_{n=1}^{N} \frac{m_n}{2} (\dot{x}_n^i)^2 - U(x_n^i)$$

- Die in den Lagrange-Gleichungen II. Art

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_n^i} = \frac{\partial L}{\partial x_n^i}$$

auftretenden Größen $\dfrac{\partial L}{\partial \dot{x}_n^i} = m_n \dot{x}_n^i = p_n^i$ sind dann offenbar die Impulse der Teilchen.

- In Anlehnung daran nennen wir die den generalisierten Koordinaten q_A zugeordneten Größen

$$p_A = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_A}, \qquad A = 1, \ldots, N_F \tag{7.3}$$

die *generalisierten Impulse.*

- Das Paar (q_A, p_A) heißt kanonisch konjugiert.

- Beispielsweise sind Winkelkoordinaten und entsprechende Drehimpulsgrößen kanonisch konjugiert (φ und L^z).

- *Hamilton-Funktion:*

  1. Definition:

$$H(q_B, p_B, t) = \sum_{A=1}^{N_F} \dot{q}_A(q_B, p_B, t) p_A - L\Big(q_B, \dot{q}_B(q_C, p_C, t), t\Big)$$

  2. **Wichtig hierbei:** Die generalisierten Geschwindigkeiten $\dot{q}_A$ sind mit Hilfe der Gleichungen (7.3) durch die generalisierten Impulse p_A auszudrücken:

$$\dot{q}_A = \dot{q}_A(q_B, p_B, t),$$

     und das muss sowohl im Summenterm als auch im zweiten Argument der Lagrange-Funktion getan werden.
  3. Auf diese Weise wird die *Hamilton-Funktion* H eine Funktion der q_A und p_A; es treten keine $\dot{q}_A$ mehr auf,

$$H = H(q_A, p_A, t)$$

  4. Wegen des Energiesatzes:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\sum_{A=1}^{N_F} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_A}\dot{q}_A - L\right) = -\frac{\partial L}{\partial t} \tag{7.4}$$

     hängt H eng mit der Energie des Systems in Beziehung.

- *Die kanonischen Gleichungen:*

  Wir verwenden obige Definitionen und berücksichtigen die Lagrange-Gleichungen II. Art:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H}{\partial q_B} &= \sum_{A=1}^{N_F} \frac{\partial \dot{q}_A}{\partial q_B} p_A - \frac{\partial L}{\partial q_B} - \sum_{A=1}^{N_F} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_A}\frac{\partial \dot{q}_A}{\partial q_B} = -\frac{\partial L}{\partial q_B} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_B} = -\dot{p}_B \\
\frac{\partial H}{\partial p_B} &= \sum_{A=1}^{N_F} \frac{\partial \dot{q}_A}{\partial p_B} p_A + \dot{q}_B - \sum_{A=1}^{N_F} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_A}\frac{\partial \dot{q}_A}{\partial p_B} \quad = \dot{q}_B \\
\frac{\partial H}{\partial t} &= \sum_{A=1}^{N_F} \frac{\partial \dot{q}_A}{\partial t} p_A - \sum_{A=1}^{N_F} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_A}\frac{\partial \dot{q}_A}{\partial t} - \frac{\partial L}{\partial t} \quad = -\frac{\partial L}{\partial t}
\end{aligned}$$

Diskussion:

- Die *kanonischen Gleichungen*

$$\dot{q}_B = \frac{\partial H}{\partial p_B}, \qquad \dot{p}_B = -\frac{\partial H}{\partial q_B} \tag{7.5}$$

  sind $2N_F$ Differentialgleichungen 1. Ordnung für die kanonisch konjugierten Größen (q_A, p_A), die abstrakt in einem $2N_F$-dimensionalen Raum, dem sogenannten *Phasenraum* definiert sind.

- Sie sind den N_F Lagrange-Gleichungen II. Art (zweiter Ordnung) völlig äquivalent.
- Hohe Symmetrie in den Gleichungen.

• *Energiesatz:*

Wegen (7.4) und $\dfrac{\partial L}{\partial t} = -\dfrac{\partial H}{\partial t}$ folgt: $\qquad \dfrac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = \dfrac{\partial H}{\partial t}$

Energieerhaltung ist also gegeben, wenn H nicht explizit zeitabhängig ist; dann ist H die Gesamtenergie, $H = T + U$.

• *Zyklische Koordinaten:*

Falls L nicht explizit von einer Koordinaten q_B abhängt, $\frac{\partial L}{\partial q_B} = 0$, so ist wegen $\frac{\partial H}{\partial q_B} = -\frac{\partial L}{\partial q_B} = 0$ auch H nicht explizit von q_B abhängig.

Dann ist der zugehörige kanonisch konjugierte Impuls eine Erhaltungsgröße:

$$0 = \frac{\partial H}{\partial q_B} = -\dot{p}_B \quad \Rightarrow \quad p_B = \text{const.}$$

Die Koordinate q_B wird zyklisch genannt (wie früher).

• *Anmerkungen*:

- Die Hamilton-Funktion wird beim Übergang zur *Quantenmechanik* in den sogenannten *Hamilton-Operator* überführt. Das bedeutet, dass nur im Hamilton-Formalismus die Brücke von klassischer und Quantenmechanik geschlagen werden kann.
- Der Hamilton-Formalismus ist entscheidende Grundlage für die statistische Physik (Betrachtung in hoch-dimensionalen Phasenräumen).

7.3 Beispiele

Generelle Herangehensweise zum Aufstellen der kanonischen Gleichungen:

1. Man stelle die Lagrange-Funktion $L = L(q_A, \dot{q}_A, t) = T - U$ auf.

2. Man bestimme die kanonischen Impulse:
$$p_A = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_A}$$

3. Man löse diese Gleichungen nach den generalisierten Geschwindigkeiten $\dot{q}_A$ auf und schreibe diese als Funktionen der q_B, p_B, t,
$$\dot{q}_A = \dot{q}_A(q_B, p_B, t)$$

4. Damit gehe man in die Definitionsgleichung der Hamilton-Funktion ein und bestimme $H = H(q_B, p_B, t)$,
$$H(q_B, p_B, t) = \sum_{A=1}^{N_F} \dot{q}_A(q_B, p_B, t) p_A - L\Big(q_B, \dot{q}_B(q_C, p_C, t), t\Big)$$
Man achte darauf, dass wirklich alle $\dot{q}_A$ zugunsten der p_A eliminiert sind.

5. Man stelle die kanonischen Gleichungen auf,
$$\dot{q}_B = \frac{\partial H}{\partial p_B}, \qquad \dot{p}_B = -\frac{\partial H}{\partial q_B}$$

Beispiele:

1. Harmonischer Oszillator:
$$\begin{aligned} L &= \frac{m}{2}\dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2}x^2 \\ p &= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} \quad \Rightarrow \quad \dot{x} = \frac{p}{m} \\ H &= \dot{x}(x,p,t)p - L\Big(x, \dot{x}(x,p,t), t\Big) = \frac{p^2}{m} - \left(\frac{m}{2}\left(\frac{p}{m}\right)^2 - \frac{m\omega^2}{2}x^2\right) \end{aligned}$$
Es folgt:
$$H(x,p,t) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$$

2. Keplerproblem in Kugelkoordinaten:

$$
\begin{aligned}
L &= \frac{m}{2}\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\vartheta}^2 + r^2\dot{\varphi}^2\sin^2\vartheta\right) + \frac{\gamma m}{r} \\
p_r &= \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r} && \Rightarrow \quad \dot{r} = \frac{p_r}{m} \\
p_\vartheta &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\vartheta}} = mr^2\dot{\vartheta} && \Rightarrow \quad \dot{\vartheta} = \frac{p_\vartheta}{mr^2} \\
p_\varphi &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2\vartheta\dot{\varphi}\sin^2\vartheta && \Rightarrow \quad \dot{\varphi} = \frac{p_\varphi}{mr^2\sin^2\vartheta} \\
H &= T + U = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\vartheta^2}{r^2} + \frac{p_\varphi^2}{r^2\sin^2\vartheta}\right) - \frac{\gamma m}{r}
\end{aligned}
$$

7.4 Poisson-Klammern

- Poisson-Klammern der klassischen Mechanik übersetzen sich in sogenannte Kommutatorrelationen in der Quantenmechanik.

- Die Poisson-Klammer

$$\{F, G\} = \sum_{A=1}^{N_F}\left(\frac{\partial F}{\partial q_A}\frac{\partial G}{\partial p_A} - \frac{\partial F}{\partial p_A}\frac{\partial G}{\partial q_A}\right) = -\{G, F\} \tag{7.6}$$

  weist zwei Funktionen $F = F(q_A, p_A, t)$ und $G = G(q_A, p_A, t)$, die auf dem Phasenraum definiert sind, eine neue Phasenraumfunktion zu.

- Hierin werden (wie in der Hamilton-Funktion) die q_A und p_A als unabhängige Variablen angesehen.

- Für $G = q_B$ bzw. $G = p_B$ folgt:

$$\{F, q_B\} = -\frac{\partial F}{\partial p_B}, \qquad \{F, p_B\} = \frac{\partial F}{\partial q_B}$$

  Speziel: $F = q_C$ bzw. $F = p_C$:

$$\{q_C, q_B\} = 0, \qquad \{p_C, p_B\} = 0, \qquad \{q_C, p_B\} = \delta_{BC}$$

- Totale Zeitableitung einer Phasenraumfunktion $F = F(q_A, p_A, t)$:

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \sum_{A=1}^{N_F} \left(\frac{\partial F}{\partial q_A} \dot{q}_A + \frac{\partial F}{\partial p_A} \dot{p}_A \right) + \frac{\partial F}{\partial t}$$

Mit den kanonischen Gleichungen $\dot{q}_B = \frac{\partial H}{\partial p_B}$, $\dot{p}_B = -\frac{\partial H}{\partial q_B}$ folgt:

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \sum_{A=1}^{N_F} \left(\frac{\partial F}{\partial q_A} \frac{\partial H}{\partial p_A} - \frac{\partial F}{\partial p_A} \frac{\partial H}{\partial q_A} \right) + \frac{\partial F}{\partial t},$$

also:

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t}$$

- Mit $F = q_A$ bzw. $F = p_A$ schreiben sich die kanonischen Gleichungen in der Form:

$$\dot{q}_A = \{q_A, H\}, \qquad \dot{p}_A = \{p_A, H\}$$

- Eine Erhaltungsgröße F ist gegeben durch $\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = 0$, also:

$$\{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t} = 0$$

Falls $\frac{\partial F}{\partial t} = 0$, gilt $\{F, H\} = 0$, und man sagt, dass die Größen F und H vertauschen.

7.5 Kanonische Transformationen

7.5.1 Definition

1. Kanonische Transformationen sind Koordinatentransformationen innerhalb des $2N_F$-dimensionalen Phasenraums (von den q_A, p_A aufgespannt),

$$Q_A = Q_A(q_B, p_B, t), \qquad P_A = p_A(q_B, p_B, t), \qquad A = 1, \dots, N_F,$$

d.h. es werden neue kanonisch konjugierte Variablen Q_A, P_A in Abhängigkeit der alten q_A, p_A eingeführt.

2. Jeder Hamilton-Funktion $H = H(q_A, p_A, t)$ wird dabei eine neue Hamilton-Funktion $H' = H'(Q_A, P_A, t)$ zugeordnet.

3. Für diese gelten dann die kanonischen Gleichungen in den neuen Variablen:
$$\dot{Q}_A = \frac{\partial H'}{\partial P_A}, \qquad \dot{P}_A = -\frac{\partial H'}{\partial Q_A},$$
wenn sie bezüglich der alten erfüllt sind,
$$\dot{q}_A = \frac{\partial H}{\partial p_A}, \qquad \dot{p}_A = -\frac{\partial H}{\partial q_A}$$

Kurz gesagt:

Kanonische Transformationen lassen die kanonischen Gleichungen invariant.

7.5.2 Konstruktion

Konstruktion kanonischer Transformationen führt über sogenannte ,,erzeugende Funktionen" R_1, R_2, R_3, R_4:

- Sei $R_1 = R_1(q_A, Q_A, t)$ eine vorgegebene Funktion, die von den alten und neuen kanonischen Koordinaten q_A und Q_A sowie der Zeit abhängt. Dann ist durch
$$p_A = \frac{\partial R_1}{\partial q_A}, \qquad P_A = -\frac{\partial R_1}{\partial Q_A}, \qquad H' = H + \frac{\partial R_1}{\partial t}$$
eine kanonische Transformation gegeben:
    1. Zunächst stelle man $p_A = \frac{\partial R_1}{\partial q_A}$ nach Q_A um und erhalte so $Q_A = Q_A(q_A, p_A, t)$.
    2. Man setzte $Q_A(q_A, p_A, t)$ nun auf der rechten Seite von $P_A = -\frac{\partial R_1}{\partial Q_A}$ ein und erhalte so $P_A = P_A(q_A, p_A, t)$.
    3. Man bilde nun die Umkehrabbildungen
    $$q_B = q_B(Q_A, P_A, t), \qquad p_B = p_B(Q_A, P_A, t)$$
    und schreibe:
    $$\begin{aligned} H'(Q_A, P_A, t) &= H\Big(q_B(Q_A, P_A, t), p_B(Q_A, P_A, t), t\Big) \\ &\quad + \frac{\partial R_1}{\partial t}\Big(q_B(Q_A, P_A, t), Q_A, t\Big) \end{aligned}$$

Beweis:

Alle Größen werden letztlich als Funktionen der neuen kanonischen Variablen Q_A, P_A (und der Zeit t) angesehen.

1.

$$\begin{aligned}
p_A &= \frac{\partial R_1}{\partial q_A}\Big(q_B(Q_C,P_C,t),Q_B,t\Big), \\
\dot{p}_A &= \sum_{B=1}^{N_F}\left[\frac{\partial^2 R_1}{\partial q_B \partial q_A}\dot{q}_B + \frac{\partial^2 R_1}{\partial Q_B \partial q_A}\dot{Q}_B\right] + \frac{\partial^2 R_1}{\partial t \partial q_A} && (7.7) \\
\frac{\partial p_A}{\partial Q_C} &= \sum_{B=1}^{N_F}\left[\frac{\partial^2 R_1}{\partial q_B \partial q_A}\frac{\partial q_B}{\partial Q_C}\right] + \frac{\partial^2 R_1}{\partial Q_C \partial q_A} && (7.8) \\
\frac{\partial p_A}{\partial P_C} &= \sum_{B=1}^{N_F}\left[\frac{\partial^2 R_1}{\partial q_B \partial q_A}\frac{\partial q_B}{\partial P_C}\right] && (7.9)
\end{aligned}$$

2.

$$\begin{aligned}
P_A &= -\frac{\partial R_1}{\partial Q_A}\Big(q_B(Q_C,P_C,t),Q_B,t\Big), \\
\dot{P}_A &= -\sum_{B=1}^{N_F}\left[\frac{\partial^2 R_1}{\partial q_B \partial Q_A}\dot{q}_B + \frac{\partial^2 R_1}{\partial Q_B \partial Q_A}\dot{Q}_B\right] - \frac{\partial^2 R_1}{\partial t \partial Q_A} && (7.10) \\
0 &= \frac{\partial P_A}{\partial Q_C} = -\sum_{B=1}^{N_F}\left[\frac{\partial^2 R_1}{\partial q_B \partial Q_A}\frac{\partial q_B}{\partial Q_C}\right] - \frac{\partial^2 R_1}{\partial Q_C \partial Q_A} && (7.11) \\
\delta_{AC} &= \frac{\partial P_A}{\partial P_C} = -\sum_{B=1}^{N_F}\left[\frac{\partial^2 R_1}{\partial q_B \partial Q_A}\frac{\partial q_B}{\partial P_C}\right] && (7.12)
\end{aligned}$$

3.

$$\begin{aligned}
H'(Q_A,P_A,t) &= H\Big(q_B(Q_A,P_A,t),p_B(Q_A,P_A,t),t\Big) \\
&\quad + \frac{\partial R_1}{\partial t}\Big(q_B(Q_A,P_A,t),Q_A,t\Big) \\
\frac{\partial H'}{\partial Q_A} &= \sum_{B=1}^{N_F}\left[\frac{\partial H}{\partial q_B}\frac{\partial q_B}{\partial Q_A} + \frac{\partial H}{\partial p_B}\frac{\partial p_B}{\partial Q_A} + \frac{\partial^2 R_1}{\partial q_B \partial t}\frac{\partial q_B}{\partial Q_A}\right] + \frac{\partial^2 R_1}{\partial Q_A \partial t}
\end{aligned}$$

Wir verwenden nun die kanonischen Gleichungen
$\dot{q}_A = \frac{\partial H}{\partial p_A}$, $\dot{p}_A = -\frac{\partial H}{\partial q_A}$:

$$\frac{\partial H'}{\partial Q_A} = \sum_{B=1}^{N_F}\left[-\dot{p}_B\frac{\partial q_B}{\partial Q_A} + \dot{q}_B\frac{\partial p_B}{\partial Q_A} + \frac{\partial^2 R_1}{\partial q_B \partial t}\frac{\partial q_B}{\partial Q_A}\right] + \frac{\partial^2 R_1}{\partial Q_A \partial t}$$

und finden mit (7.10) sowie (7.7, 7.8):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H'}{\partial Q_A} + \dot{P}_A &= \sum_{B=1}^{N_F}\left[\frac{\partial q_B}{\partial Q_A}\left(-\dot{p}_B + \frac{\partial^2 R_1}{\partial q_B \partial t}\right) + \dot{q}_B\left(\frac{\partial p_B}{\partial Q_A} - \frac{\partial^2 R_1}{\partial q_B \partial Q_A}\right)\right. \\
&\qquad \left. - \frac{\partial^2 R_1}{\partial Q_A \partial Q_B}\dot{Q}_B\right] \\
&= \sum_{B=1}^{N_F}\left[\frac{\partial q_B}{\partial Q_A}\left(-\sum_{C=1}^{N_F}\left[\frac{\partial^2 R_1}{\partial q_C \partial q_B}\dot{q}_C + \frac{\partial^2 R_1}{\partial Q_C \partial q_B}\dot{Q}_C\right] - \frac{\partial^2 R_1}{\partial t \partial q_B} + \frac{\partial^2 R_1}{\partial q_B \partial t}\right)\right. \\
&\qquad \left. + \dot{q}_B\left(\sum_{C=1}^{N_F}\frac{\partial^2 R_1}{\partial q_C \partial q_B}\frac{\partial q_C}{\partial Q_A} + \frac{\partial^2 R_1}{\partial Q_A \partial q_B} - \frac{\partial^2 R_1}{\partial q_B \partial Q_A}\right) - \frac{\partial^2 R_1}{\partial Q_B \partial Q_A}\dot{Q}_B\right] \\
&= \sum_{C=1}^{N_F}\dot{Q}_C\left[-\sum_{B=1}^{N_F}\frac{\partial^2 R_1}{\partial Q_C \partial q_B}\frac{\partial q_B}{\partial Q_A} - \frac{\partial^2 R_1}{\partial Q_C \partial Q_A}\right]
\end{aligned}$$

Die eckige Klammer verschwindet wegen (7.11), und es folgt:

$$\dot{P}_A = -\frac{\partial H'}{\partial Q_A}$$

4. Analog (verwende nun auch (7.9) und (7.12)):

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial H'}{\partial P_A} &= \sum_{B=1}^{N_F}\left[\frac{\partial H}{\partial q_B}\frac{\partial q_B}{\partial P_A}+\frac{\partial H}{\partial p_B}\frac{\partial p_B}{\partial P_A}+\frac{\partial^2 R_1}{\partial q_B \partial t}\frac{\partial q_B}{\partial P_A}\right] \\
&= \sum_{B=1}^{N_F}\left[\left(-\dot{p}_B+\frac{\partial^2 R_1}{\partial q_B \partial t}\right)\frac{\partial q_B}{\partial P_A}+\dot{q}_B\frac{\partial p_B}{\partial P_A}\right] \\
&= \sum_{B=1}^{N_F}\left[\frac{\partial q_B}{\partial P_A}\left(-\sum_{C=1}^{N_F}\left[\frac{\partial^2 R_1}{\partial q_C \partial q_B}\dot{q}_C+\frac{\partial^2 R_1}{\partial Q_C \partial q_B}\dot{Q}_C\right]-\frac{\partial^2 R_1}{\partial t \partial q_B}+\frac{\partial^2 R_1}{\partial q_B \partial t}\right)\right. \\
&\quad \left.+\dot{q}_B\sum_{C=1}^{N_F}\frac{\partial^2 R_1}{\partial q_C \partial q_B}\frac{\partial q_C}{\partial P_A}\right] \\
&= -\sum_{C=1}^{N_F}\dot{Q}_C\sum_{B=1}^{N_F}\frac{\partial^2 R_1}{\partial Q_C \partial q_B}\frac{\partial q_B}{\partial P_A} = -\sum_{C=1}^{N_F}\dot{Q}_C\delta_{CA} = -\dot{Q}_A
\end{aligned}
$$

Damit ergeben sich die kanonischen Gleichungen bezüglich Q_A, P_A, H' aus denjenigen für q_A, p_A, H, und damit ist durch die Erzeugende $R_1 = R_1(q_A, Q_A, t)$ eine kanonische Transformation gegeben.

- Analog lassen sich erzeugende Funktionen R_2, R_3, R_4 bilden, die von anderen Paaren konjugierter Variablen abhängen und kanonische kanonische Transformationen bewirken:

$$
\begin{aligned}
R_1 &= R_1(q_A, Q_A, t), & p_A &= \frac{\partial R_1}{\partial q_A}, & P_A &= -\frac{\partial R_1}{\partial Q_A}, & H' &= H+\frac{\partial R_1}{\partial t} \\
R_2 &= R_2(q_A, P_A, t), & p_A &= \frac{\partial R_2}{\partial q_A}, & Q_A &= \frac{\partial R_2}{\partial P_A}, & H' &= H+\frac{\partial R_2}{\partial t} \\
R_3 &= R_3(p_A, Q_A, t), & q_A &= -\frac{\partial R_3}{\partial p_A}, & P_A &= -\frac{\partial R_3}{\partial Q_A}, & H' &= H+\frac{\partial R_3}{\partial t} \\
R_4 &= R_4(p_A, P_A, t), & q_A &= -\frac{\partial R_4}{\partial p_A}, & Q_A &= \frac{\partial R_4}{\partial P_A}, & H' &= H+\frac{\partial R_4}{\partial t}
\end{aligned}
$$

- Man kann die zu einer Erzeugenden R_1 gehörenden Funktionen R_2, R_3, R_4, d.h., die dieselben kanonische Transformation wie R_1 bewirken, durch sogenannte ,,Legendre-Transformationen" ermitteln:

$$\begin{aligned} R_2 &= R_1 + \sum_{A=1}^{N_F} P_A Q_A \\ R_3 &= R_1 - \sum_{A=1}^{N_F} p_A q_A \\ R_4 &= R_1 - \sum_{A=1}^{N_F} p_A q_A + \sum_{A=1}^{N_F} P_A Q_A \end{aligned}$$

- Beispiele:

1. $R_1 = \sum_{A=1}^{N_F} q_A Q_A$. Es folgt:

   $Q_A = p_A, \quad P_A = -q_A, \quad H'(Q_A, P_A, t) = H(q_A, p_A, t) = H(-P_A, Q_A, t)$

   Harmonischer Oszillator:

   $$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2, \qquad H' = \frac{Q^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} P^2$$

   Transformation vertauscht (bis auf Vorzeichen) generalisierte Impulse und Koordinaten.

2. $R_2 = \sum_{A=1}^{N_F} q_A P_A$

   $$Q_A = q_A, \quad P_A = p_A, \quad H'(Q_A, P_A, t) = H(q_A, p_A, t)$$

   Identische Transformation

3. $R_2 = \sum_{A=1}^{N_F} f_A(q_B, t) P_A$, beschreibt wegen

   $$Q_A = f_A(q_B, t)$$

   eine räumliche Koordinatentransformation im Konfigurationsraum der q_A.

- *Bemerkungen:*

  – Kanonische Transformationen kann man zur Vereinfachung der Hamilton-Funktion bzw. der kanonischen Gleichungen verwenden.

  – Poisson-Klammern sind gegenüber kanonischen Transformationen invariant, d.h.

$$\{F, G\} = \sum_{A=1}^{N_F} \left(\frac{\partial F}{\partial q_A} \frac{\partial G}{\partial p_A} - \frac{\partial F}{\partial p_A} \frac{\partial G}{\partial q_A} \right) = \sum_{A=1}^{N_F} \left(\frac{\partial F}{\partial Q_A} \frac{\partial G}{\partial P_A} - \frac{\partial F}{\partial P_A} \frac{\partial G}{\partial Q_A} \right)$$

7.6 Hamilton-Jacobi-Theorie

- *Idee:* Suche eine geeignete Erzeugende $R_2 = R_2(q_A, P_A, t)$, so dass die resultierende Hamilton-Funktion $H' = H + \frac{\partial R_2}{\partial t}$ identisch verschwindet:

$$H' = 0 \qquad \Rightarrow \quad Q_A = \text{const.}, \quad P_A = \text{const.} \tag{7.13}$$

- Mit

$$p_A = \frac{\partial R_2}{\partial q_A}$$

  lautet die Bedingung $H' = 0$:

$$H\left(q_A, \frac{\partial R_2}{\partial q_A}, t\right) + \frac{\partial R_2}{\partial t} = 0 \tag{7.14}$$

- Die *Hamilton-Jacobi-Gleichung* (7.14) ist eine *partielle* Differentialgleichung erster Ordnung zur Bestimmung der erzeugenden Funktion $R_2 = R_2(q_A, P_A, t)$, durch die die kanonischen Gleichungen auf die triviale Form (7.13) umgeformt werden.

- Die Erzeugende R_2 wird als Lösung der Hamilton-Jacobi-Gleichung die *Hamiltonsche Prinzipalfunktion* genannt.

- Es zeigt sich, dass die Prinzipalfunktion R_2 längs der Bahnkurve mit der Wirkung übereinstimmt:

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}R_2}{\mathrm{d}t} &= \sum_{A=1}^{N_F}\left[\frac{\partial R_2}{\partial q_A}\dot{q}_A + \frac{\partial R_2}{\partial P_A}\dot{P}_A\right] + \frac{\partial R_2}{\partial t} \\ &= \sum_{A=1}^{N_F} p_A\dot{q}_A - H = L,\end{aligned}$$

wobei wir die Hamilton-Jacobi-Gleichung $H + \frac{\partial R_2}{\partial t} = 0$ sowie $\dot{P}_A = 0$ und $p_A = \frac{\partial R_2}{\partial q_A}$ berücksichtigt haben. Damit folgt:

$$R_2 = \int L\,\mathrm{d}t.$$

- Falls die Prinzipalfunktion $R_2 = R_2(q_A, P_A, t)$ bekannt ist, erhält man die Bahnkurven $q_A(t)$ folgendermaßen:

  1. Wir nehmen an, dass R_2 als Lösung von (7.14) von N_F Konstanten P_A abhängt. Dann nennen wir R_2 ein *vollständiges Integral.*
  2. Wir bilden $\frac{\partial R_2}{\partial P_A}$ und setzen diese Ausdrücke gleich N_F neuen Konstanten Q_A:
  $$\frac{\partial R_2}{\partial P_A} = Q_A. \tag{7.15}$$
  3. Nun lösen wir diese Gleichungen nach den q_A auf, und erhalten die q_A als Funktionen der Zeit und parametrisch in Abhängigkeit der $2N_F$ Integrationskonstanten Q_A, P_A.
  4. Als letztes bestimmen wir diese Konstanten mittels gegebener Anfangslagen und -geschwindigkeiten.

- Separationsansatz zur Lösung von (7.14) am Beispiel der kräftefreien Bewegung eines Massenpunktes:

  1. Hamilton-Funktion in den alten Koordinaten:
  $$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$$
  2. Einsetzen in Hamilton-Jacobi-Gleichung:
  $$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\partial R_2}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial R_2}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial R_2}{\partial z}\right)^2\right] + \frac{\partial R_2}{\partial t} = 0 \tag{7.16}$$

3. *Additiver* Separationsansatz:

   $$R_2(x,y,z,t;P_x,P_y,P_z) = T(t)+S(x,y,z) = T(t)+S_1(x)+S_2(y)+S_3(z)$$

   führt auf:

   $$\frac{1}{2m}\left([S_1'(x)]^2+[S_2'(y)]^2+[S_3'(z)]^2\right) = -T'(t) \tag{7.17}$$

   Beide Seiten hängen nun von verschiedenen Variablen ab und müssen daher konstant sein, $T'(t) = \text{const.}$
4. Wegen $E = H = H' - \frac{\partial R_2}{\partial t} = -T'(t)$ folgt:

   $$R_2 = -Et + S(x,y,z)$$

5. Damit wird (7.17) zu:

   $$[S_1'(x)]^2 = 2mE - \left([S_2'(y)]^2+[S_3'(z)]^2\right)$$

   Wieder hängen beide Seiten von verschiedenen Variablen ab und müssen daher konstant sein, $S_1(x) = P_x x$.
6. Einsetzen und Fortführen dieser Schlussweise führt schließlich auf:

   $$R_2(x,y,z,t;P_x,P_y,P_z) = -Et + P_x x + P_y y + P_z z$$

7. Einsetzen in (7.16) liefert uns eine Bedingung an die aufgetretenen Konstanten:

   $$E = \frac{1}{2m}\left(P_x^2+P_y^2+P_z^2\right),$$

   und schließlich folgt:

   $$R_2(x,y,z,t;P_x,P_y,P_z) = -\frac{1}{2m}\left(P_x^2+P_y^2+P_z^2\right)t+P_x x+P_y y+P_z z$$

8. Bilden von (7.15) liefert:

   $$\frac{\partial R_2}{\partial P_x} = -\frac{P_x}{m}t + x = Q_x \quad\Rightarrow\quad x = Q_x + \frac{P_x}{m}t$$

   (analog für (y,z)).
9. Die Q_A sind die Anfangslagen und die P_A die Anfangsimpulse (zum Zeitpunkt $t=0$).