Hamilton Formalismus der Mechanik

Im nun folgenden zweiten Vorlesungsabschnitt zur analytischen Mechanik wollen wir uns einer alternativen Formulierung der Mechanik jenseits des Lagrange-Formalismus zuwenden.

Die Grundidee für diese alternative Formulierung – dem sogenannten Hamilton-Formalismus – liegt in einer geschickten Wahl der Systemkoordinaten:

Im Lagrange-Formalismus haben wir (neben der Zeit) mit verallgemeinerten Koordinaten q_i und entsprechenden verallgemeinerten Geschwindigkeiten $\dot{q}_i$ gearbeitet. Dabei haben wir gesehen, daß in Anwesenheit von Symmetrien die verallgemeinerten Koordinaten geschickt so gewählt werden können, daß der Lagrangian $\mathcal{L}$ nicht von einzelnen Koordinaten q_k abhängt, was wiederum dazu führt, daß die entsprechenden Impulse $p_k = \frac{\partial}{\partial \dot{q}_k} \mathcal{L}$ erhalten sind.

Es scheint daher sinnvoll, das System nicht durch $\{q_i, \dot{q}_i\}$ sondern durch $\{q_i, p_i\}$ zu beschreiben und entsprechend den Lagrangian $\mathcal{L}(q, \dot{q}, t)$ durch eine neue Funktion, den sogenannten Hamiltonian $\mathcal{H}(q, p, t)$, zu ersetzen.

Wir sind also daran interessiert eine Koordinaten- oder allgemeiner Variablen-Transformation $\dot{q}_i \longleftrightarrow p_i$ vorzunehmen. Dazu werden wir die sogenannte Legendre-Transformation benutzen.

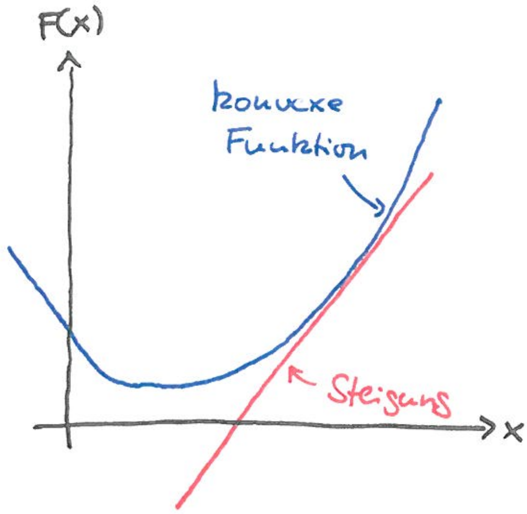
Legendre-Transformationen

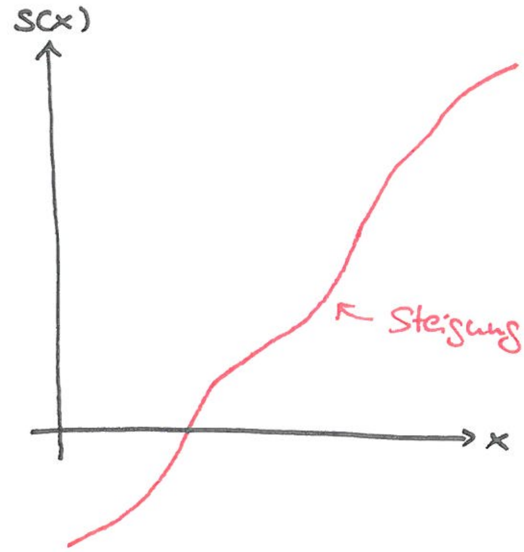
Bevor wir uns der speziellen Anwendung der Legendre-Transformation als Verbindung zwischen Lagrangian und Hamiltonian zuwenden, wollen wir einen etwas allgemeineren Blick auf die Legendre-Transformation werfen. Dieses grundlegende Verständnis wird uns auch in anderen Bereichen der theoretischen Physik, insbesondere etwa der Thermodynamik, von großem Nutzen sein.

Betrachten wir also allgemein eine Funktion $F(x)$, welche von der Variablen x abhängen soll. Wir wollen den Informationsgehalt, welcher in der Funktion $F(x)$ kodiert ist, in anderer Form ausdrücken. Eine derartige Situation haben wir bereits früher in der Vorlesung angetroffen als wir über Fourier-Transformationen gesprochen haben: $\tilde{F}(k) = \int dx\, F(x)\, e^{ikx}$.
Dabei stellen wir die Funktion F als Summe von Exponentialfunktionen dar, und kodieren die Information in $F(x)$ via die Stärke der einzelnen Komponenten.

Die Legendre-Transformation stellt eine alternative Möglichkeit dar, die Information in einer Funktion $F(x)$ neu zu kodieren, wenn zwei Voraussetzungen erfüllt sind.

- die Funktion $F(x)$ ist konvex, d.h. $\frac{d^2}{dx^2} F(x) > 0$, und stetig
- es ist besonders praktikabel, die Ableitungen der Funktion $F(x)$ zu betrachten





Konvexe Funktion $F(x)$

$$\frac{d^2F(x)}{dx^2} > 0 \longrightarrow$$

Steigung $S(x) = \frac{dF(x)}{dx}$

$$\frac{dS(x)}{dx} > 0$$

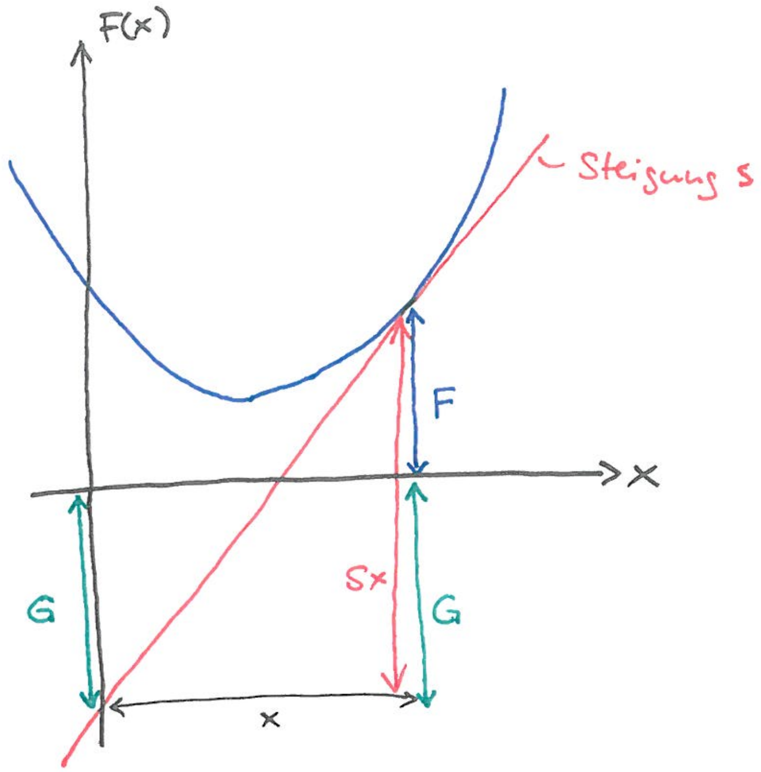
<u>strikt monoton</u> ✓

$S(x)$ invertierbar $\rightarrow x = x(s)$

Für eine konvexe Funktion $F(x)$ gibt es ein 1:1-Mapping zwischen x und $\frac{dF(x)}{dx}$. Wir können also den Informationsgehalt der Funktion $F(x)$ auch via $\frac{dF(x)}{dx}$ ausdrücken. Genau dies tut die Legendre-Transformation, welche definiert ist als:

$$\boxed{G(s) = s \cdot x(s) - F(x(s))}$$

Betrachten wir zunächst geometrisch, was die einzelnen Terme in dieser Transformation bedeuten:



geometrisch gilt:

$$sx = F + G$$

Betrachten wir die Eigenschaften der so definierten Legendre-Transformation:

1) **Inversion**

Betrachte $G(s)$. Es sei $y(s) = \frac{dG}{ds} = \frac{d}{ds}\left(s\cdot x(s) - F(x(s))\right)$

$$= x(s) + s\cdot\frac{dx}{ds} - \underbrace{\frac{dF}{dx}}_{s}\cdot\frac{dx}{ds}$$

$$= x(s)$$

Somit $H(x) = x\cdot s(x) - G(s(x)) = F(x)$. ✓

Die Legendre-Transformation von G ist die ursprüngliche Funktion F $\rightarrow$ die Legendre-Transformation ist ihr eigenes Inverses.

Dies drückt sich insbesondere in der symmetrischen Schreibweise

$$\boxed{G(s) + F(x) = x\cdot s}$$

aus.

Hierbei gilt zu beachten, daß es nur jeweils eine unabhängige Variable gibt – entweder x oder s.

Diese beiden Variablen bilden ein konjungiertes Paar.

Es gilt:

$$\boxed{x(s) = \frac{dG(s)}{ds} \quad \text{und} \quad s(x) = \frac{dF(x)}{dx}}$$

2) Extrema

Für unsere Beispiel-Funktion $F(x)$ gibt es ein eindeutig bestimm Minimum $F_{min} = F(x_{min})$, für welches gilt $s(x_{min}) = 0$

Mit

$$F(x) = x \cdot s(x) - G(s(x)) \xrightarrow{\text{folgt}} \boxed{F(x_{min}) = -G(0)}.$$

Analog gilt: $\boxed{G(s_{min}) = -F(0)}$

Für ein allgemeines Extremum (Minimum oder Maximum) gilt:

$$G(0) + F(e_{ext}) = 0 \quad \text{und} \quad F(0) + G(s_{ext}) = 0$$

3) Höhere Ableitungen

Fassen wir die bisher betrachteten symmetrischen Beziehungen noch einmal zusammen:

$$G(s) + F(x) = x \cdot s$$

$$x = \frac{dG}{ds} \quad \text{und} \quad s = \frac{dF}{dx}$$

Für höhere Ableitungen, speziell die zweiten Ableitungen, lassen sich entsprechend symmetrische Zusammenhänge zeigen. Insbesondere

$$\frac{d^2G}{ds^2} = \frac{dx}{ds} \quad \text{und} \quad \frac{d^2F}{dx^2} = \frac{ds}{dx}$$

Mit $\frac{dx}{ds} \cdot \frac{ds}{dx} = 1$ ergibt sich daraus:

$$\boxed{\left(\frac{d^2G}{ds^2}\right) \cdot \left(\frac{d^2F}{dx^2}\right) = 1}$$

wobei x und s konjungierte Variablen sind.

Wir stellen also fest, daß die lokalen Krümmungen (zweiten Ableitungen) zweier via Legendre-Transformation verknüpften Funktionen (F und G) zueinander invers sind – was wiederum reminiszent ist einer Unschärferelation $\Delta x \cdot \Delta k \approx 1$, wie wir sie auch im Zusammenhang mit der Fourier-Transformation schon beobachtet haben.

Multiple Variablen

Betrachte $F(\vec{x})$. Es sei: $\vec{s} = (s_1, s_2, \ldots, s_m)$ mit $s_i = \frac{\partial F}{\partial x_i}$.
Dann gilt für die Legendre-Transformation:

$$\boxed{\vec{s} \cdot \vec{x} = G(\vec{s}) + F(\vec{x})}$$

Hamilton - Funktion

Mit diesem Wissen über Legendre-Transformationen ausgerüstet begeben wir uns zurück in die analytische Mechanik und berechnen die Legendre-Transformation des Lagrangians $\mathcal{L}(q, \dot{q}, t)$ für die konjugierten Variablen $\dot{q}_i$ und $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} = p_i$. Damit $\dot{q}_i = \dot{q}_i(q, p, t)$ und

$$\boxed{\mathcal{H}(q,p,t) = \sum_{i=1}^{f} p_i \cdot \dot{q}_i(q,p,t) - \mathcal{L}(q, \dot{q}(q,p,t), t)}$$

typischerweise konvex, denn $\mathcal{L}(q,\dot{q},t) \sim \dot{q}^2$

Berechnen wir jetzt die partiellen Ableitungen der Hamilton-Funktion:

$$\frac{\partial H}{\partial q_k} = \sum_{i=1}^{f} p_i \cdot \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_k} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} - \sum_{i=1}^{f} \underbrace{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}}_{=p_i} \cdot \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_k}$$

$$= -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} \overset{(EL)}{=} -\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k}\right) = -\dot{p}_k$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_k} = \sum_{i=1}^{f} p_i \cdot \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial p_k} + \dot{q}_k - \sum_{i=1}^{f} \underbrace{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}}_{=p_i} \cdot \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial p_k} = \dot{q}_k$$

Damit erhalten wir die sogenannten kanonischen Gleichungen

$$\boxed{\dot{p}_k = -\frac{\partial H(q,p,t)}{\partial q_k} \quad \text{und} \quad \dot{q}_k = \frac{\partial H(q,p,t)}{\partial p_k}}$$

Die tatsächlichen physikalischen Bahnbewegungen ergeben sich also als Lösung dieser kanonischen Gleichungen, welche auch Hamilton-Gleichungen genannt werden.

Was die Form dieser Hamilton-Gleichungen angeht, so stellen wir fest, daß der Übergang von den Euler-Lagrange Gleichungen zu den Hamilton-Gleichungen einen Übergang von f DGL 2. Ordnung zu $2f$ DGL 1. Ordnung entspricht.

Betrachten wir schließlich die Zeitableitung des Hamiltonians:

$$\frac{d}{dt} H(q,p,t) = \sum_{i=1}^{f} \Big(\underbrace{\frac{\partial H(q,p,t)}{\partial q_i}}_{= -\dot{p}_i} \dot{q}_i + \underbrace{\frac{\partial H(q,p,t)}{\partial p_i}}_{= \dot{q}_i} \dot{p}_i \Big) + \frac{\partial H}{\partial t}$$

$$= \frac{\partial H(q,p,t)}{\partial t}$$

Die partielle Ableitung des Hamiltonian nach der Zeit berechnen wir über dessen Definition via Legendre-Transformation

$$\frac{\partial}{\partial t} H(q,p,t) = \frac{\partial}{\partial t} \Big(\sum_{i=1}^{f} p_i \cdot \dot{q}_i(q,p,\underline{\underline{t}}) - \mathcal{L}(q, \dot{q}(q,p,\underline{\underline{t}}), \underline{\underline{t}}) \Big)$$

$$= \sum_{i=1}^{f} p_i \cdot \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial t} - \sum_{i=1}^{f} \underbrace{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}}_{= p_i} \cdot \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial t} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}$$

$$= - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}$$

Wir erkennen also, daß der Hamiltonian seine explizite Zeitabhängigkeit vom Lagrangian erbt $\boxed{\frac{\partial H}{\partial t} = - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}}$.

In Problemen ohne explizite Zeitabhängigkeit gilt dann $\frac{d}{dt} H(q,p,t) = 0$, so daß der Hamiltonian selbst eine Erhaltungsgröße des Systems beschreibt!

*

Betrachten wir nun ein einfaches Beispiel, um die Bedeutung des Hamiltonians zu verstehen: ein Punktteilchen in kartesischen Koordinaten mit Lagrangian

$$\mathcal{L}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = \frac{m}{2} \dot{\vec{q}}^{\,2} - U(\vec{q}, t) \qquad \text{mit } \vec{q} = (q_x, q_y, q_z)$$

Der Impuls nimmt damit koordinatenweise $(i = x, y, z)$ die Form

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} = m \dot{q}_i$$

an, woraus sich ergibt

$$\dot{q}_i(\vec{p}) = \frac{p_i}{m}.$$

Führen wir nun die Legendre-Transformation aus

$$H(\vec{q}, \vec{p}, t) = \sum_{i=x,y,z} p_i \cdot \frac{p_i}{m} - \mathcal{L}\left(\vec{q}, \frac{\vec{p}}{m}, t\right)$$

$$= \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + U(\vec{q}, t)$$

Insbesondere erkennen wir nun, daß der Hamiltonian der Gesamtenergie eines Systems entspricht. Der Hamiltonian hat also im Gegensatz zum Lagrangian eine direkte physikalische Bedeutung.

Weiterhin stellen wir fest, daß die potentielle Energie ihr Vorzeichen bei der Legendre-Transformation von $\mathcal{L}(\vec{q},\dot{\vec{q}},t)$ zu $\mathcal{H}(\vec{q},\vec{p},t)$ gewechselt hat. Daß dem so sein muß ergibt sich unmittelbar aus der symmetrischen Form der Legendre-Transformation

$$\boxed{\mathcal{L}(\vec{q},\dot{\vec{q}},t) + \mathcal{H}(\vec{q},\vec{p},t) = \dot{\vec{q}}\cdot\vec{p}}$$

Sämtliche Terme, welche keine explizite Abhängigkeit von $\dot{\vec{q}}$ oder $\vec{p}$ haben, müssen mit unterschiedlichen Vorzeichen in $\mathcal{L}$ und $\mathcal{H}$ auftauchen. Dies gilt insbesondere für $U(q,t)$.

Kehren wir zurück zu unserem Beispiel und stellen die Bewegungsgleichungen auf:

$$\dot{\vec{q}} = \frac{\vec{p}}{m}$$

$$\dot{\vec{p}} = -\frac{\partial U(\vec{q},t)}{\partial \vec{q}}$$

Dies entspricht den Newtonschen Bewegungsgleichungen, denn

$$\ddot{\vec{q}} = \frac{\dot{\vec{p}}}{m} \quad \rightarrow \quad m\ddot{\vec{q}} = -\frac{\partial U}{\partial \vec{q}} \quad \checkmark$$

Weiterhin gilt:

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} = \frac{\partial U(\vec{q},t)}{\partial t}$$

Poisson - Klammern

Wir wenden uns heute noch einmal der mathematischen Struktur des Phasenraums zu und betrachten die Zeitentwicklung einer beliebigen physikalischen Größe $F(q, p, t)$. Dies wird uns zur Definition der sogenannten Poisson - Klammern führen und schließlich einer alternativen Form der Bewegungsgleichungen. Die Poisson - Klammer ist von fundamentaler Bedeutung, stellt sie doch eine der Brücken von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik dar. Ihr quantenmechanisches Pendant ist der sogenannte Kommutator.

Betrachten wir also die Zeitabhängigkeit einer beliebigen phys. Größe $F(q, p, t)$:

$$\frac{d}{dt} F(q,p,t) = \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial F}{\partial q_i} \underbrace{\frac{dq_i}{dt}}_{= \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}} + \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial F}{\partial p_i} \underbrace{\frac{dp_i}{dt}}_{= \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}} + \frac{\partial F}{\partial t}$$

$$= \underbrace{\sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial q_i} \right)}_{\text{Poisson-Klammer } \{F, H\}} + \frac{\partial F}{\partial t}$$

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

Dabei haben wir die sogenannte Poisson-Klammer eingeführt. Allgemein läßt sich diese für zwei Größen $F(q,p,t)$ und $G(q,p,t)$ definieren als:

$$\boxed{\{F,G\} = \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial G}{\partial q_i} \right)}$$

Aus dieser Definition ergeben sich unmittelbar einige charakteristische Eigenschaften:

$$\{F,F\} = 0$$

$$\{F,G\} = -\{G,F\}$$ antisymmetrisch

$$\{aF + bF', G\} = a \cdot \{F,G\} + b\{F',G\}$$ linear

$$\{a, F\} = 0$$

$$\{F \cdot F', G\} = F\{F',G\} + \{F,G\}F'$$ Produktregel

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

Jacobi-Identität

Diese Definition der Poissonklammer birgt somit einige Ähnlichkeit zum Skalarprodukt zweier Funktionen.

Zurück zur Zeitentwicklung der physikalischen Größe $F(q,p,t)$ haben wir also:

$$\boxed{\frac{dF}{dt} = \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t}}$$

Wenn die Größe F selbst keine explizite Zeitabhängigkeit besitzt, d.h. $F = F(q,p)$ und $\partial F/\partial t = 0$, so ist sie genau dann eine Erhaltungsgröße, wenn gilt

$$\boxed{F(q,p) \text{ Erhaltungsgröße} \iff \{F,H\} = 0}$$

Insbesondere sehen wir auch hier wieder $\frac{dH}{dt} = \{H,H\} + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}$ d.h. ohne explizite Zeitabhängigkeit ist der Hamiltonian eine Erhaltungsgröße.

Weiterhin können wir berechnen:

- Sei $G(q,p,t) = q_j$ dann

$$\{F, q_j\} = \sum_{i=1}^{f} \left\{ \frac{\partial F}{\partial q_i} \cdot \underbrace{\frac{\partial q_j}{\partial p_i}}_{=0} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \underbrace{\frac{\partial q_j}{\partial q_i}}_{=\delta_{ij}} \right\} = - \frac{\partial F}{\partial p_j}$$

- Sei $G(q,p,t) = p_j$ dann

$$\{F, p_j\} = \sum_{i=1}^{f} \left\{ \frac{\partial F}{\partial q_i} \cdot \underbrace{\frac{\partial p_j}{\partial p_i}}_{=\delta_{ij}} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \underbrace{\frac{\partial p_j}{\partial q_i}}_{=0} \right\} = \frac{\partial F}{\partial q_j}$$

Daraus ergibt sich unmittelbar:

$$\{q_i, q_j\} = - \frac{\partial q_i}{\partial p_j} = 0 \quad ; \quad \{p_i, p_j\} = \frac{\partial p_i}{\partial q_j} = 0$$

$$\{q_i, p_j\} = + \frac{\partial q_i}{\partial q_j} = \delta_{ij}$$

Die Poisson-Klammern ermöglichen es weiterhin, die kanonischen Gleichungen auf eine sehr kompakte und symmetrische Form zu bringen:

$$\boxed{\dot{p}_i = \{p_i, \mathcal{H}\} \quad \text{und} \quad \dot{q}_i = \{q_i, \mathcal{H}\}}$$

denn, $\{p_i, \mathcal{H}\} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = \dot{p}_i$ und $\{q_i, \mathcal{H}\} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} = \dot{q}_i$

Phasenraum

In dieser Vorlesung führen wir unsere konzeptionellen Betrachtungen zur Hamiltonschen Mechanik fort und lenken unsere Aufmerksamkeit auf den $2f$-dimensionalen Raum, in welchem wir die Hamilton-Funktion $H(\vec{q},\vec{p})$ definiert haben – dabei vernachlässigen wir bis auf weiteres eine explizite Abhängigkeit von der Zeit.

Zuvor haben wir gesehen, daß die Hamiltonschen Gleichungen gekoppelte Gleichungen in den Koordinaten $\vec{q} = (q_1, q_2, \dots, q_f)$ und den Impulsen $\vec{p} = (p_1, p_2, \dots, p_f)$ sind, und daß ein gegebenes Paar $(\vec{q},\vec{p})$ hinreichend viel Information enthält, um den Zustand eines mechanischen Systems eindeutig zu beschreiben.
Es liegt also nahe, neue $2f$-komponentige Objekte

$$\vec{X} = (\vec{q},\vec{p}) = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

zu definieren und diese als fundamentale Variablen der Hamiltonschen Mechanik zu benutzen. Den von diesen Variablen aufgespannten Raum bezeichnen wir als Phasenraum. Lokal können wir uns diesen Phasenraum als Vektorraum vorstellen, global kann die Identifizierung Phasenraum $\leftrightarrow$ Vektorraum jedoch für manche physikalische Systeme nicht gelten.

Unter Ausschließung dieser Spezialfälle mögen wir im folgenden den Phasenraum als Vektorraum betrachten, dem wir folgende formale Struktur geben wollen:

$$\vec{x} = (\underbrace{x_1, x_2, \ldots, x_f}_{x_i = q_i}, \underbrace{x_{f+1}, x_{f+2}, \ldots, x_{2f}}_{x_{f+i} = p_i}) = (\vec{q}, \vec{p})$$

Damit können wir die kanonischen Gleichungen schreiben als

$$\dot{x}_i = \frac{\partial}{\partial x_{i+f}} H$$

$$\dot{x}_{i+f} = - \frac{\partial}{\partial x_i} H \qquad \text{mit } i = 1, 2, \ldots, f$$

Eine kompakte Schreibweise dieser Gleichungen ist

$$\boxed{\dot{x}_i = I_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} H} \qquad \text{mit } i = 1, 2, \ldots, 2f$$

oder in Vektornotation

$$\dot{\vec{x}} = I \frac{\partial}{\partial \vec{x}} H$$

wobei die Matrix I eine $2f \times 2f$ Matrix der Form

$$\boxed{I = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1}_f \\ -\mathbb{1}_f & 0 \end{pmatrix}}$$

ist und $\mathbb{1}_f$ eine f-dimensionale Einheitsmatrix.

Die Matrix I wird auch <u>symplektische Einheitsmatrix</u> genannt.

Hamiltonian - Fluß

Für einen beliebigen Punkt $\vec{x} = (\vec{q}, \vec{p})$ im Phasenraum definiert die Größe $I \frac{\partial}{\partial \vec{x}} H(\vec{x})$ einen Vektor im Phasenraum, d.h. die Zuordnung

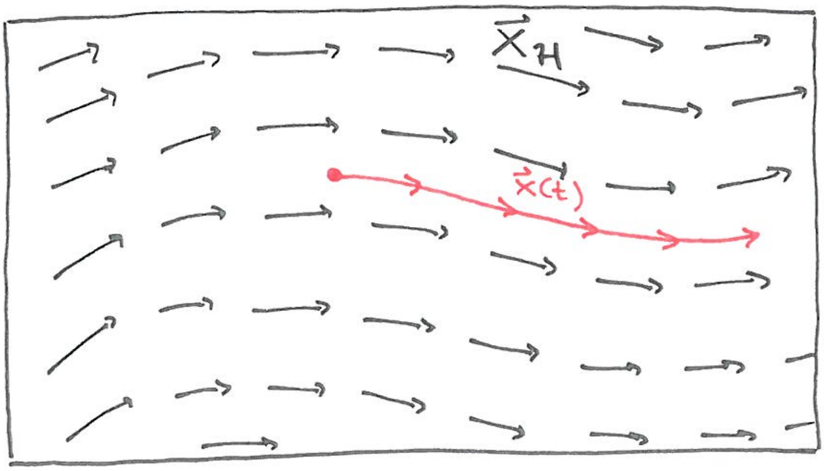
$$\vec{X}_H : \boxed{\vec{x} \longrightarrow I \frac{\partial}{\partial \vec{x}} H(\vec{x})}$$

definiert ein Vektorfeld im Phasenraum, welches auch Hamilton - Vektorfeld genannt wird.

Die Form der Hamilton - Gleichungen

$$\dot{\vec{x}} = \vec{X}_H(\vec{x})$$

legt eine Interpretation in Form sogenannter "Flußlinien" nahe: Jedem Punkt im Phasenraum $\vec{x}$ ordnet das Hamilton - Vektorfeld $\vec{X}_H$ einen Vektor $\vec{X}_H(\vec{x})$ zu. Die Hamilton - Gleichung besagt nun, daß die physikalische Bahnkurve $\vec{x}(t)$ tangential zu diesem Vektor läuft $\dot{x}(t) = \vec{X}_H(\vec{x})$. Dies läßt sich wie folgt visualisieren



Im Rahmen dieser Interpretation ist der Betrag von $\vec{X}_{\mathcal{H}}(\vec{x})$ ein Maß für die Stärke des lokalen Flusses, welcher die Trajektorie der physikalischen Bahnkurve folgt.

- Etwas formaler ausgedrückt können wir für ein beliebiges Vektorfeld $\vec{V}$ eine Zuordnung

$$\phi : (\vec{x}, t) \longrightarrow \phi(\vec{x}, t)$$

definieren, für welche gelten soll

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{x}, t) = \vec{V}(\phi(\vec{x}, t)).$$

Wir nennen diese Zuordnung den Fluß des Vektorfeldes $\vec{V}$.

- In unserem Fall definiert also der Fluß des Hamilton-Vektorfelds, oder Hamilton-Fluß, die Trajektorie der Bahnkurve $\vec{x}(t)$ im Phasenraum, d.h.

$$\phi(\vec{x}, t) = \vec{x}(t)$$

mit

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{x}, t) = \frac{d}{dt} \vec{x}(t) = \vec{X}_{\mathcal{H}}(\vec{x}(t)).$$

Für eine gegebene Startkonfiguration $\vec{x}(0)$ definiert der Hamilton-Fluß eine eindeutige Trajektorie $\vec{x}(t)$ im Phasenraum.

Diese Beobachtung hat unmittelbar zur Folge, daß sich Trajektorien im Phasenraum niemals kreuzen.

Trajektorien im Phasenraum

Wir wollen uns diesen Hamilton-Fluß im Phasenraum und die sich ergebenden Trajektorien etwas genauer anschauen. Um den $2f$-dimensionalen Phasenraum graphisch darstellen zu können, beschränken wir uns zunächst auf Probleme mit einem einzigen Freiheitsgrad, $f=1$.

Um die möglichen Trajektorien eines Hamiltonians $\mathcal{H}(q,p)$ im nunmehr zwei-dimensionalen Phasenraum (q,p) zu klassifizieren, erinnern wir uns, daß die Energie $E = \mathcal{H}(q,p) = \text{const}$ erhalten ist, wenn der Hamiltonian keine explizite Zeitabhängigkeit besitzt. Dies erlaubt es uns explizite Darstellungen $q = q(p,E)$ oder $p = p(q,E)$ durch Lösen der Gleichung $\mathcal{H}(q,p) = E$ nach q oder p zu finden. Diese Herangehensweise entspricht keiner präzisen Lösung des tatsächlichen physikalischen Problems, da wir nicht in der Lage sein werden die Zeitentwicklung entlang der gefundenen Trajektorien zu beschreiben — auf der anderen Seite können wir mit dem oben beschriebenen Zugang für jeden Punkt des Phasenraums $\vec{x} = (q,p)$ alle Trajektorien (und deren Form) bestimmen, welche durch diesen Punkt laufen, und das ohne eine Differentialgleichung lösen zu müssen.

Betrachten wir hierzu ein erstes Beispiel:

Phasenraumtrajektorien des harmonischen Oszillators

Betrachten wir hierzu noch einmal den Hamiltonian des ein-dimens harmonischen Oszillators

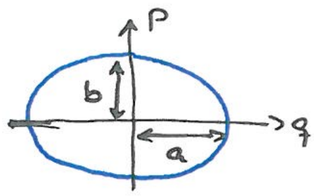
$$\mathcal{H}(q,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2 = E \quad \text{const}$$

Für diesen Hamiltonian gibt es geschlossene Darstellungen der Trajektorien (und Lösungen der Hamilton-Gleichungen)

$$p = p(q,E) = \pm \sqrt{2m\left(E - \frac{m\omega^2}{2} q^2\right)}$$

Bei diesen Kurven handelt es sich um Ellipsen mit Halbachsen

$$a = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \quad \text{und} \quad b = \sqrt{2mE}$$



Die für eine gegebene Energie E definierte Fläche dieser Ellipse wird auch als Phasenraumvolumen $V_\Gamma(E)$ bezeichnet:

$$V_\Gamma(E) = \int_{\mathcal{H}(q,p)<E} \!\!\cdots\! \int dp_1\, dp_2 \ldots dp_f\, dq_1\, dq_2 \ldots dq_f$$

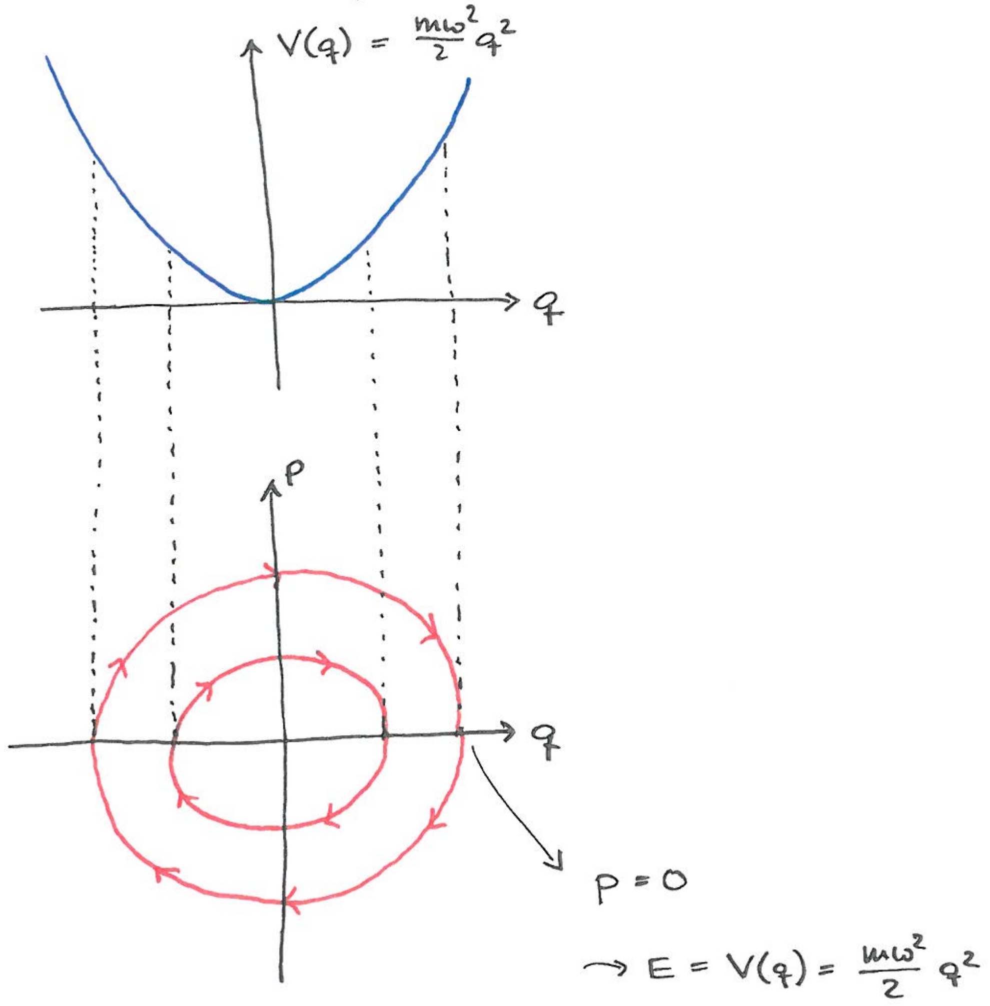
$$= \iint_{\mathcal{H}(q,p)} dp\, dq = \pi a b = \frac{2\pi E}{\omega} \quad \text{für den harmonischen Oszillato}$$

Wir stellen fest, daß selbst in einem endlichen Phasenraumvolumen unendlich viele Konfigurationen $\vec{x} = (q,p)$ liegen. Beim Übergang zur Quantenmechanik wird dies nicht mehr der Fall sein, da ein quantenmechanisches Zustand im Gegensatz zu seinem klassischen Pendant nicht ein infinitesimales sondern endliches Phasenraum...

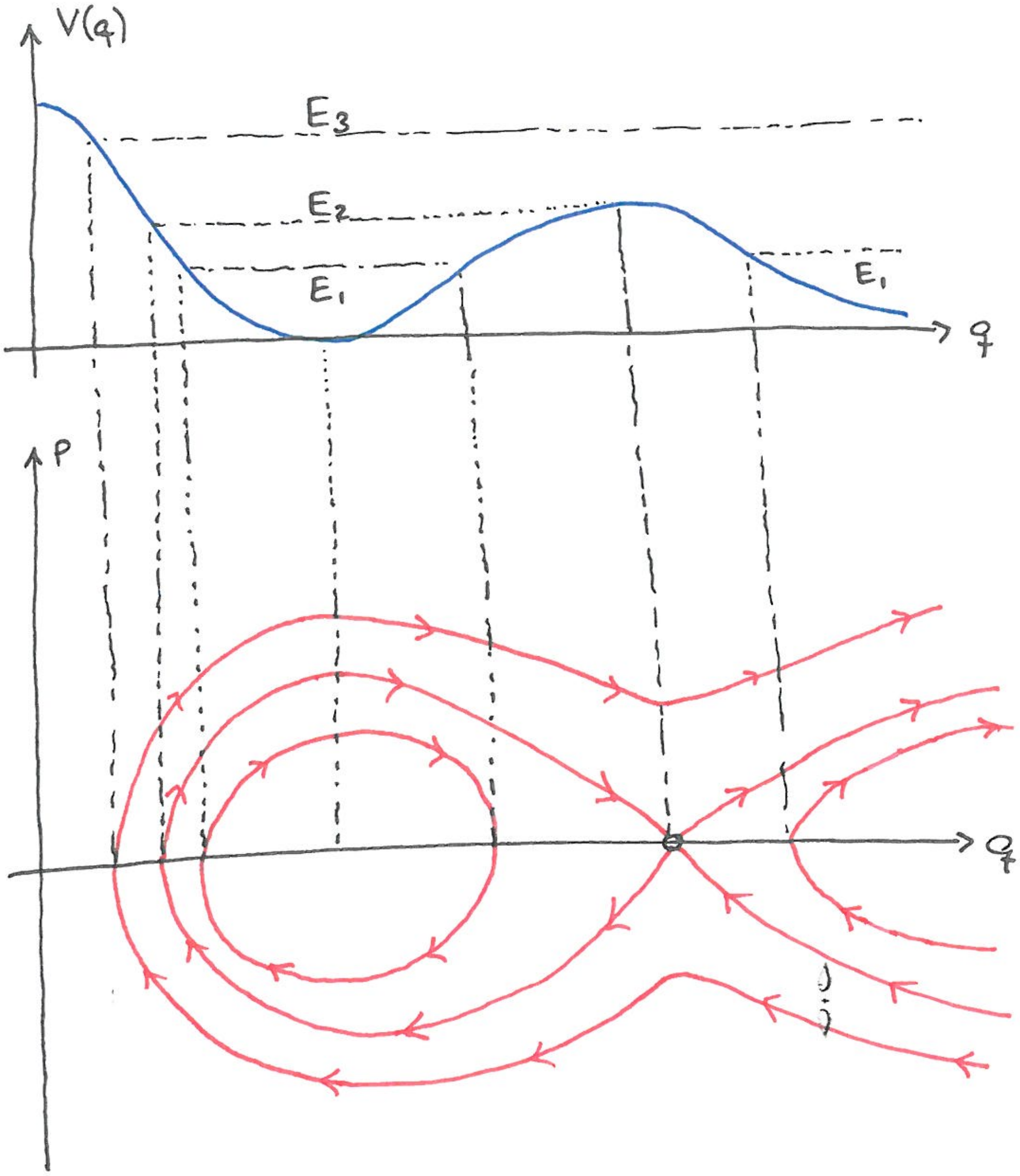
Die oben gefundenen Ellipsen sind tangential zum Hamilton - Vektorfeld

$$\vec{X}_{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} \frac{p}{m} \\ -m\omega^2 q \end{pmatrix} \quad , \qquad = \underline{I}\ \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \mathcal{H}(\vec{x})$$

was die folgende Darstellung ermöglicht



Betrachten wir als nächstes ein etwas komplexeres Beispiel ($\rightarrow$ nächste Seite), für welches die Hamilton-Gleichungen nicht mehr geschlossen gelöst werden können, wir aber immer noch die Trajektorienformen wie oben $\mathcal{H}(p,q) = E \rightarrow p = p(q,E)$ bestimmen können:



Wir sehen in diesem nicht-trivialen Beispiel speziell für die Energie E_2 besonderes Verhalten: Im Phasenraum scheint sich ein Kreuzungspunkt zu ergeben – was wir ausgeschlossen hatten. Tatsächlich handelt es sich hiebei auch nicht um einen Kreuzungspunkt – die beiden eingehenden Trajektorien enden vielmehr in diesem Punkt: es bedarf unendlicher Zeit, um den "kritischen Punkt" auf einer der einlaufenden Trajektorien zu erreichen. Ähnliches gilt für die auslaufenden Trajektorien – wegen $p=0$ dauert es unendlich lange, den Potentialberg in eine der beiden Richtungen zu verlassen. Die Trajektorien berühren sich in diesem kritischen Punkt, aber kreuzen sich nicht. Solche Trajektorien heißen Separatrize.