

Hamilton-Funktion und Hamiltonsche Bewegungsgleichungen

Motivation: Die Hamiltonsche Formulierung der klassischen Mechanik

- erweitert Klasse der zulässigen koordinaten Transf. (wichtig für Diskussion v. Symmetrien)
- ist ideal für formale Diskussion der mathematischen Struktur der klassischen Mechanik.
- verdeutlicht den Bezug der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik.

Zentrale Ergebnisse (Vorschau):

Def: "Hamilton-Funktion":

$$H(q, p, t) := \sum_k p_k \dot{q}_k - L(q, \dot{q}, t) \quad \text{wobei} \quad p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \quad \text{und} \quad \dot{q}_k = \dot{q}_k(q, p) \quad (1)$$

Hamiltonschen Bewegungsgleichungen:

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k} \quad \text{h: Plancksche Konstante} \quad (2)$$

Def: "Poisson-Klammer":

$$F = F(q, p, t), \quad G = G(q, p, t) \\ = F(q(t), p(t), t)$$

$$\{F, G\} = \sum_k \left[\frac{\partial F}{\partial q_k} \frac{\partial G}{\partial p_k} - \frac{\partial F}{\partial p_k} \frac{\partial G}{\partial q_k} \right] \xrightarrow{\text{QM}} \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}, \hat{G}] \quad (3)$$

Bewegungsgl. ausgedrückt durch Poisson-Klammern:

$$\frac{dF}{dt} = \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t} \xrightarrow{\text{QM}} \frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \quad (4)$$

Einfachstes Beispiel: freies Teilchen in konservativem Kraftfeld

Lagrange-Funktion:

$$L = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V(q, t) \quad (1)$$

Kanonischer Impuls:

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m \dot{q}, \quad \Rightarrow \quad \dot{q} = \dot{q}(q, p) = p/m \quad (2)$$

Hamilton-Funktion:

$$H(p, q) \stackrel{(1)}{=} p \dot{q} - L = p(p/m) - \left[\frac{1}{2} m (p/m)^2 - V \right] \quad (3) \\ = \frac{p^2}{2m} + V(q, t) = \text{Energie} \quad (4)$$

Hamilton-Gl:

$$\dot{q} \stackrel{(1,2)}{=} \frac{\partial H}{\partial p} \stackrel{(4)}{=} p/m; \quad \dot{p} \stackrel{(1,2)}{=} -\frac{\partial H}{\partial q} = -\frac{\partial V}{\partial q} = (N_2) \quad (5)$$

Poisson-Klammer für $F = q, G = p$:

$$\{q, p\} \stackrel{(1,3)}{=} \frac{\partial q}{\partial q} \frac{\partial p}{\partial p} - \frac{\partial q}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial q} = 1 \cdot 1 - 0 \cdot 0 = 1 \quad (6)$$

$F(q(t), p(t)) := q(t)$

$$\left. \begin{array}{l} (1,3) \xrightarrow{\text{QM}} \\ \frac{1}{i\hbar} [\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \end{array} \right\} \text{Vorschau} \quad \text{Inscription auf Grabstein von Max Born}$$

Zeitentwicklung von q via Poisson-Klammern:

$$\frac{dq}{dt} \stackrel{(1,4)}{=} \{q, H\} + \frac{\partial q}{\partial t} = \frac{\partial q}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{\partial q}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} \left[\frac{p^2}{2m} + V \right] = p/m \quad (7)$$

Allgemeine Formulierung

H3

Verallg. Koordinaten seien: $q = (q_1, \dots, q_f)$, $\dot{q} = (\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f)$ (1)

Kanonischen Impulse: $p = (p_1, \dots, p_f)$, mit $p_i = \frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}_i}$ (2)

Ziel: ein Formalismus, dessen Variablen nicht (q, \dot{q}) sondern (q, p) sind!

Def: Hamilton-Funktion (engl: Hamiltonian):
Ein System, das durch eine Langrange-Funktion mit $\det \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} \right) = \det(M_{ij}) \neq 0$ (3)

beschrieben wird, heisst "kanonisch". Ein kanonisches System hat eine sog. Hamiltonfunktion.

$H(q_1, \dots, q_f; p_1, \dots, p_f, t) := \sum_k p_k \dot{q}_k(q, p, t) - L(q, \dot{q}(q, p, t), t)$ (4)
"Vektoren", wie in (1)

Die unabhängigen Variablen der Hamilton-Funktion sind:

- die generalisierten Koordinaten q_i , $\forall i = 1, \dots, f$
- die generalisierten Impulse ("kanonisch konjugierten Impulse") $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ $\forall i = 1, \dots, f$ (5)
= "verallgemeinerte Impulse"

- "p und q sind unabhängige Variablen" bedeutet: $\frac{\partial q_i}{\partial p_i} = 0$, $\frac{\partial p_i}{\partial q_j} = 0$ (6)

Bemerkung: (3.4) ist eine Legendre-Transformation von L zu H, wodurch die \dot{q} durch p als unabhängige Variable ersetzt wird. Wozu die Einschränkung (3.3)?

H4

Um $H = (3.4)$ zu konstruieren muss sich \dot{q}_k eindeutig als $\dot{q}_k = \dot{q}_k(q, p, t)$ ausdrücken lassen. (1)

Anders gesagt, $p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = p_k(q, \dot{q}, t)$ muss sich nach den \dot{q}_k auflösen lassen. (2)

Nach dem Satz über invertierbare Funktionen ist dies genau dann möglich, wenn die Matrix

$M_{kj} = \frac{\partial p_k}{\partial \dot{q}_j} \stackrel{(2)}{=} \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_j \partial \dot{q}_k}$ invertierbar ist, d.h. $\det(M_{kj}) \neq 0$ (3)
(vergleiche 3.3)

invertierbar ist, das System also kanonisch ist. Plausibilitätsarg. für diesen Satz:

Betrachte die Funktionen $p_k = f_k(q, \dot{q}, t)$, $k = 1, \dots, f$ (4)

Taylor-Entw. nach 2.tem Argument:
 $= f_k(q, 0, t) + \sum_{j=1}^f \left[\frac{\partial p_k}{\partial \dot{q}_j} \right]_{\dot{q}=0} \dot{q}_j + O(\dot{q}^2)$ (5)

Betrachte Limes $\dot{q}_k \rightarrow 0$:
 $\Rightarrow \sum_j \underbrace{\left[\frac{\partial p_k}{\partial \dot{q}_j} \right]_{\dot{q}=0}}_{M_{kj}} \dot{q}_j \approx p_k - f_k(q, 0, t)$ (6)
 $\begin{pmatrix} \dots \\ \dots \\ \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{q}_1 \\ \vdots \\ \dot{q}_f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_1 - f_1 \\ \vdots \\ p_f - f_f \end{pmatrix}$

(6) ist nur nach $\dot{q}_j = \dot{q}_j(q, p)$ lösbar, falls M_{kj} invertierbar ist, d.h. falls (3) gilt. (7)

Wenn kinetische Energie quadratisch ist in den verallgemeinerten Geschwindigkeiten und das Potenzial geschwindigkeitsunabhängig, ist das System immer kanonisch:

HS

Sei $T = \frac{1}{2} \sum_{ij} \dot{q}_i T_{ij} \dot{q}_j$, mit $T_{ij} = \text{symmetrisch, positiv definit}$ (alle Eigenwerte sind > 0) (1)

$\Rightarrow M_{ij} = \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} = T_{ij}$, mit $\Rightarrow \det M_{ij} \neq 0$ (2)

Beispiel: Kugelkoordinaten:
(siehe Blatt 6, Hausaufg.)

$T = \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi}^2)$ (3)
 $V = 0$

$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m \dot{r} \Rightarrow \dot{r} = p_r / m$ (4)

$p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = m r^2 \dot{\theta} \Rightarrow \dot{\theta} = \frac{p_\theta}{m r^2}$ (5)

$p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = m r^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi} \Rightarrow \dot{\varphi} = \frac{p_\varphi}{m r^2 \sin^2 \theta}$ (6)

$M = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & m r^2 & 0 \\ 0 & 0 & m r^2 \sin^2 \theta \end{pmatrix}$

= invertierbar!

$H = \sum_k p_k \dot{q}_k - T = \left[p_r \left(\frac{p_r}{m} \right) + p_\theta \left(\frac{p_\theta}{m r^2} \right) + p_\varphi \frac{p_\varphi}{m r^2 \sin^2 \theta} \right]$ (7)

$\overset{my}{=} \frac{1}{2m} \left[p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\varphi^2}{r^2 \sin^2 \theta} \right]$ (8)

Eselsbrücke um sich zu merken: H hängt nicht von \dot{q}

$H = \sum_j p_j \dot{q}_j - L(q, \dot{q}, t)$ (1)

$\left. \frac{\partial H(p, q, \dot{q})}{\partial \dot{q}_k} \right|_{p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}} = \left[p_k - \frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}_k} \right]_{p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}} = 0$ (2)

Beispiel: freies Teilchen:

$H = p \dot{r} - \frac{1}{2} m \dot{r}^2$
 $\left. \frac{\partial H}{\partial \dot{r}} \right|_{p = m \dot{r}} = (p - m \dot{r})_{p = m \dot{r}} = 0$

Satz: für ein kanonisches System sind die Lagrange-Gleichungen (2. Art) äquivalent zu den "Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (HG)" ("kanonische Bewegungsgleichungen"):

$\forall k = 1, \dots, f: \quad \dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k} \quad (3a) \quad \dot{p}_k = - \frac{\partial H}{\partial q_k} \quad (3b) \quad (HG)$

Bemerkung: aus f Differentialgleichungen 2. Ordnung (L2) werden äquivalent 2f Diff.Gl. 1. Ordnung (HG). Folglich hat Hamilton-Formalismus mehr unabhängige Variablen (2f statt f), und erlaubt somit eine größere Klasse von Transformationen.

z.B. $\uparrow q(t)$

\uparrow ("kanonischen Transf.")

HS6

H57

Beweis, Teil 1:
(L2) \Rightarrow (H9)

Betrachte:
$$\frac{\partial H}{\partial p_k} \stackrel{(1)}{=} \frac{\partial}{\partial p_k} \left[\sum_j p_j \dot{q}_j(q,p,t) - L(q,\dot{q}(q,p,t),t) \right] = 0 \quad (1)$$

(H3.5): $\frac{\partial q_j}{\partial p_k} = 0$

\Rightarrow

$$= \dot{q}_k(q,p,t) + \sum_j p_j \frac{\partial \dot{q}_j(q,p,t)}{\partial p_k} - \sum_j \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}}_{p_j \text{ (3.2)}} \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_k}$$

Vergleiche dagegen
Lagrange:
 $\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_k} = 0$

Betrachte ferner:

$$\frac{\partial H}{\partial q_k} \stackrel{(6.1)}{=} \frac{\partial}{\partial q_k} \left[\sum_j p_j \dot{q}_j(q,p,t) - L(q,\dot{q}(q,p,t),t) \right] = 0 \quad (2)$$

(H3.6): $\frac{\partial p_j}{\partial q_k} = 0$

$$\frac{\partial H}{\partial q_k} = \sum_j p_j \frac{\partial \dot{q}_j(q,p,t)}{\partial q_k} - \left[\frac{\partial L}{\partial q_k} + \sum_j \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}}_{p_j \text{ (3.2)}} \frac{\partial \dot{q}_j(q,p,t)}{\partial q_k} \right] \quad (3)$$

$$= - \frac{\partial L}{\partial q_k} \stackrel{(L2)}{=} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) \quad (4)$$

$$\frac{\partial H}{\partial q_k} = - \dot{p}_k = (6.3b) \quad \text{Teil 1: } \square \quad (5)$$

H8

Beweis, Teil 2:
(H9) \Rightarrow (L2)

Gegeben $H(q,p,t)$, drücke Impulse als $p = p(q,\dot{q},t)$ ^{mittels (H9)} aus, und def. Lagrange-

$$L(q,\dot{q},t) \stackrel{(3.4)}{=} \sum_j p_j(q,\dot{q},t) \dot{q}_j - H(q,p(q,\dot{q},t),t) \quad (1)$$

Betrachte:

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = \sum_j \frac{\partial p_j}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_j + p_k - \sum_j \underbrace{\frac{\partial H}{\partial p_j}}_{(H9a) \dot{q}_j} \frac{\partial p_j}{\partial \dot{q}_k} \quad (2)$$

$= p_k$ reproduziert Def. v. kanonischem Impuls (2')

Betrachte:

$$\frac{\partial L}{\partial q_k} = \sum_j \frac{\partial p_j}{\partial q_k} \dot{q}_j - \left[\frac{\partial H}{\partial q_k} + \sum_j \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial p_j}{\partial q_k} \right] \quad (3)$$

(H9b) $- \dot{p}_k$ \dot{q}_j (H9a)

$$= \dot{p}_k \stackrel{(2')}{=} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) \text{ reproduziert (L2)} \quad (4)$$

Satz: Für System mit skleronomen (zeitunabhängigen) Zwangsbedingungen und Geschwindigkeitsunabhängigem Potential ist die Hamilton-Funktion gerade die Gesamtenergie des Systems, ausgedrückt durch die verallgemeinerten Koordinaten und Impulse.

(Bemerkung: in diesem Fall hat H eine klare physikalische Bedeutung! Vorteil gegenüber Lagrange...)

Beweis: ~~Zeit~~ skleronome Zwangsbedingung ist kinetische Energie eine quadratische Form in den \dot{q}_j

$$T = \frac{1}{2} \sum_{ij} T_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j, \quad V = V(q, t) \quad (1)$$

Kanonische Impulse: $H = \sum_k \dot{q}_k p_k - L = 2T - (T - V) = T + V \quad (2)$
 $p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = \sum_j T_{kj} \dot{q}_j = \sum_j T_{jk} \dot{q}_j = \sum_j T_{kj} \dot{q}_j = \text{Energie!} \quad \square$
 (weil $T_{kj} = T_{jk}$)

Bemerkung: Sind die Potentiale zeitunabhängig, ist die Hamilton-Funktion eine Erhaltungsgröße (3)

$$\frac{dH(q, p, t)}{dt} = \sum_j \left[\frac{\partial H}{\partial q_j} \frac{dq_j}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{dp_j}{dt} + \frac{\partial H}{\partial t} \right] \quad (4)$$

Laut Annahme

$$(H\dot{q}) = \sum_j \left[-\dot{p}_j \dot{q}_j + \dot{q}_j \dot{p}_j \right] = 0 \quad (5) \quad \square$$

Satz: Falls die Hamilton-Funktion nicht von einer bestimmten generalisierten Koordinate abhängt (zyklische Koordinate), ist der dazugehörige kanonisch konjugierte Impuls eine Erhaltungsgröße.
 (Annahme: q_k ist zyklisch)

Beweis: Aus $0 = \frac{\partial H}{\partial q_k}$ folgt \square (1)

Mathematische Ergänzung: "Legendre-Transformation"

Betrachte Funktion: $f(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, (2)

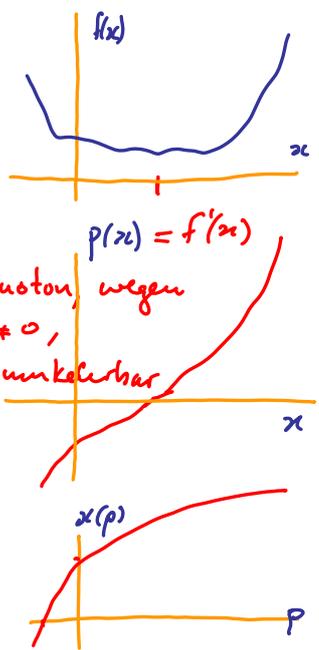
mit $f''(x) \neq 0 \quad \forall x$ (3)

Definiere die Funktion: $p(x) := f'(x)$; (4)

Deren Umkehrfunktion sei $x = x(p)$; (5)
 (diese existiert wegen $f'' \neq 0$)

Dann ist die Legendre-Transformierte von $f(x)$

die Funktion $\tilde{f}(p) := p x(p) - f(x(p))$ (6)
 Definition / Konstruktion



Beispiel:

$$f(x) = \frac{1}{\alpha} x^\alpha, \quad \forall x > 0, \alpha \neq 2. \quad (1) \quad \boxed{\text{HS 11}}$$

$$p(x) = f'(x) = x^{\alpha-1} \quad (2)$$

Umkehrfunktion von (2): $x(p) := p^{\frac{1}{\alpha-1}} \quad (3)$

$$\tilde{f}(p) \stackrel{(10.6)}{=} p x(p) - f(x(p)) = \underbrace{p^{1 + \frac{1}{\alpha-1}}}_{p^{\frac{\alpha}{\alpha-1}}} - \frac{1}{\alpha} \underbrace{\left[p^{\frac{1}{\alpha-1}} \right]^\alpha}_{p^{\frac{\alpha}{\alpha-1}}} = \frac{1}{\beta} p^\beta \quad (4) \quad \text{mit } \beta = \frac{\alpha}{\alpha-1}$$

Bemerkung: Die Legendre-Trf. hat interessante mathematische Eigenschaften. Y.B. führt sie zweifach ausgeführt zur Identität. Im Beispiel oben: $(\alpha \rightarrow \beta; \beta \rightarrow \gamma)$

$$\tilde{\tilde{f}}(\gamma) = \frac{1}{\gamma} \gamma^\gamma, \quad \text{mit } \gamma = \frac{\beta}{\beta-1} = \frac{\frac{\alpha}{\alpha-1}}{\frac{\alpha}{\alpha-1} - 1} = \frac{\alpha}{\alpha - (\alpha-1)} = \alpha \quad (5)$$
$$= \frac{1}{\alpha} \gamma^\alpha \stackrel{(1)}{=} f(\gamma) \quad (6)$$

Bei der Legendre-Trf. geht also keine Information verloren, nur Wechsel der unabhängigen Variablen.

Verallgemeinerung der Legendre-Transformation auf Funktionen mehrerer Variablen:

HS 12

Betrachte:

(x_k steht für \dot{q}_k oben)

$$f(x_1, \dots, x_f) \quad \text{mit} \quad \det \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right] \neq 0 \quad (1)$$

Definiere:

$$p_k := \frac{\partial f}{\partial x_k} \quad \text{und Umkehrfunktionen seien } x_k = x_k(p) \quad (2)$$

↳ existieren, wegen (1) (3)

Legendre-Transf.:

$$\tilde{f}(p_1, \dots, p_f) := \sum_k p_k x_k(p) - f(x_1(p), \dots, x_f(p))$$

Bemerkung:

Definition

Damit ist die Hamilton-Funktion die Legendre-Transformation der Lagrange-Funktion bezüglich der generalisierten Geschwindigkeiten. (Die generalisierten Koordinaten werden nicht transformiert!)

$$\begin{aligned} x &\leftrightarrow \dot{q} \\ p &\leftrightarrow p \end{aligned}$$

$$H(q_1, \dots, q_f; p_1, \dots, p_f, t) := \sum_k p_k \dot{q}_k(q, p, t) - L(q, \dot{q}(q, p, t), t)$$