Kapitel 3

Hamiltonsche Mechanik

Das Lagrange-Formalismus liefert uns die Bewegungsgleichungen in der Form von einem System von Differentialgleichungen zweiter Ordnung für verallgemeinerte Koordinaten. Solches System beschreibt das physikalische System zwar vollständig, ist aber nicht so günstig für Untersuchungen:

1) Das System hat nicht die Form $\dot{x}_i = F_i(x)$ eines Systems von $2n$ Differentialgleichungen erster Ordnung.

2) Es ist nicht einfach, die Erhaltungsgröße zu nutzen, weil die Grade des System wird nicht gleich reduziert werden.

3) Die Lagrangefunktion hat keine direkte physikalische Bedeutung, deshalb ist dieses Konzept an Experimentatoren schwer vermittelbar.

Alle diese Nachteile werden im Hamiltonformalismus bewältigt. Eigentlich wird dieses Formalismus in 4/5 theoretischer Physik benutzt, insbesondere in der Quantenmechanik und in der statistischen Physik.

Wir fangen mit dem Ziel an, das System Differentialgleichungen 1. Ordnung zu schreiben. Weil die Lagrangegleichungen lauten

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i}$$

die Idee ist, der verallgemeinerte Impuls p_i als unabhängige Koordinate zu nehmen. Falls wir auch die verallgemeinerten Geschwindigkeiten $\dot{q}_i$ zugunsten der verallgemeinerten Impulse eliminieren, können wir ein System von Differentialgleichungen 1. Ordnung erhalten. Manchmal ist die Beziehung zwischen Geschwindigkeiten und Impulsen einfach ($p = m\dot{q}$), aber wir sollen ein Rezept für alle Fälle haben. Dies wird mit Hilfe der Legendre-Transformation gemacht.

3.1 Hamiltonsche Gleichungen

Wir berechnen das volle Differential von der Lagrange Funktion $L = L(q, \dot{q}, t)$, $q = q_1, \ldots, q_s$:

$$dL = \sum_i^s \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \sum_i^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt.$$

Bei Definition $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = p_i$, wobei p_i sind die verallgemeinerte Impulse und $\frac{\partial L}{\partial q_i} = \dot{p}_i$ nach der Lagrange Gleichung. Dann schreiben wir

$$dL = \sum \dot{p}_i dq_i + \sum p_i d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt.$$

Wir benutzen jetzt dass

$$d(p_i \dot{q}_i) = dp_i \dot{q}_i + p_i d\dot{q}_i$$

und schreiben den zweiten Term um:

$$dL = \sum \dot{p}_i dq_i + \sum d(p_i \dot{q}_i) - \sum dp_i \dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt.$$

$$d(L - \sum p_i \dot{q}_i) = \sum \dot{p}_i dq_i - \sum dp_i \dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt.$$

Die Funktion $H(p, q, t) = \sum p_i \dot{q}_i - L$ heisst die **Hamilton Funktion**. Wir bekommen

$$dH = -\sum \dot{p}_i dq_i + \sum \dot{q}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt.$$

Das Differential von H können wir auch so schreiben:

$$dH = \sum \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \sum \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt.$$

Aus dem Vergleich von Koeffizienten bekommen wir das Gleichungssystem

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H(q, p, t)}{\partial q_i}, \qquad \dot{q}_i = \frac{\partial H(q, p, t)}{\partial p_i}.$$

Die Gleichungen heißen **Hamiltonsche bzw. kanonische Gleichungen**. Die Koordinaten und Impulse bezeichnet man als kanonische Variablen.

Den Ausdruck $(\sum p_i \dot{q}_i - L)$ haben wir schon gesehen: Das ist genau die verallgemeinerte Energie, die erhalten bleibt, falls die Lagrangefunktion zeitunabhängig ist. Also die physikalische Bedeutung der Hamiltonfunktion ist klar: das ist die Energie, die als Funktion von verallgemeinerten Koordinaten und Impulsen geschrieben ist. Zeigen wir jetzt, daß der Wert der Hamiltonfunktion erhalten ist, wenn die Funktion nicht explizit von der Zeit abhängig ist:

$$\frac{dH}{dt} = \sum_i^s \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} \dot{q}_i \right) + \frac{\partial H}{\partial t} = \sum_i^s \left(-\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} + \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}$$

Es ist zu betonen, daß die Hamiltonfunktion eine Funktion der kanonischen Variablen sein muß (z.B. $H(q, \dot{q}, t)$ ist *keine* Hamiltonfunktion).

Beispiel 3.1 *Teilchen in einem Potential*

$$L = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - V(x, y, z)$$

Der verallgemeinerte Impuls ist

$$p_x = m\dot{x}, \quad p_y = m\dot{y}, \quad p_z = m\dot{z}$$

und die Hamiltonfunktion lautet

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x, y, z)$$

Beispiel 3.2 *Teilchen im elektromagnetischen Feld*

$$L = \frac{m}{2}\dot{\vec{q}}^2 - e\Phi + \frac{e}{c}(\dot{\vec{q}}\vec{A})$$

Der verallgemeinerte Impuls ist

$$p_i = m\dot{q}_i + \frac{e}{c}A_i, \quad \vec{p} = m\dot{\vec{q}} + \frac{e}{c}\vec{A}$$

Wir setzen also

$$\dot{\vec{q}} = \frac{1}{m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})$$

in die Hamiltonfunktion ein:

$$H = \vec{p}\dot{\vec{q}} - L = \frac{\vec{p}}{m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}) - \frac{m}{2}(\frac{1}{m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}))^2 + e\Phi - \frac{e}{c}\frac{1}{m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})\vec{A} = \frac{(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2}{2m} + e\Phi$$

Legendre-Transformation

Mathematisch gesehen, ist der Übergang von $L(q, \dot{q}, t)$ zu $H(p, q, t)$ die *Legendre-Transformation.* Sei $f(x)$ eine Funktion, dann die neue Funktion $g(p)$ bekommt man durch

$$g(p) = px - f(x), \qquad \text{wobei} \qquad p = \frac{df}{dx}.$$

Weil p von x abhängig ist, können wir die Gleichung nach x ableiten

$$\frac{dg}{dp}\frac{dp}{dx} = \frac{dp}{dx}x + p - \frac{df}{dx}$$

Also erhalten wir

$$x = \frac{dg}{dp}$$

Das heißt, daß die Legendre-Transformation völlig symmetrisch ist

$$g(p) + f(x) = px, \quad x = \frac{dg}{dp}, \quad p = \frac{df}{dx}$$

In anderen Worten, zwei mal angewandte Legendre-Transformation ist die identische Transformation.

Die Legendre-Transformation wird in der statistischen Physik viel benutzt. Hier verwenden wir sie zum Übergang von Geschwindigkeit zum Impuls. Wir schreiben

$$\begin{aligned} f(x) \quad &\leftrightarrow \quad L(q, \dot{q}, t) \\ x \quad &\leftrightarrow \quad \dot{q} \\ p = \frac{d\,f}{dx} \quad &\leftrightarrow \quad p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \\ g(p) = px - f(x) \quad &\leftrightarrow \quad H(p, q, t) = p\dot{q} - L(q, \dot{q}, t) \end{aligned}$$

Beispiel 3.3 *Quadratische Funktion*

$$f(x) = ax^2 \quad \Rightarrow \quad p = 2ax \quad \Rightarrow \quad x = \frac{p}{2a} \quad \Rightarrow \quad g(p) = px - f(x) = \frac{p^2}{4a}$$

Warum vollzieht man die Variablentransformation nicht einfach "durch Einsetzung"? Das kann man klarmachen wenn mann die Transformation und die Einsetzung für zwei Funktionen ax^2 und $a(x + b)^2$ vergleicht.

Einsetzung für $f(x) = ax^2$:

$$p = \frac{df}{dx} = 2ax \qquad x = \frac{p}{2a} \qquad g(p) = \frac{p^2}{4a}$$

Einsetzung für $f(x) = a(x+b)^2$:

$$p = \frac{df}{dx} = 2a(x+b) \qquad x = \frac{p}{2a} - b \qquad g(p) = \frac{p^2}{4a}$$

Die Rücktransformation kann nicht eindeutig sein.
Legendre-Transformation für $f(x) = ax^2$:

$$g(p) = px - f(x) = \frac{p^2}{4a}$$

Legendre-Transformation für $f(x) = a(x+b)^2$:

$$g(p) = px - f(x) = p(\frac{p}{2a} - b) - a(\frac{p}{2a})^2 = \frac{p^2}{4a} - pb\ .$$

Die Legendre Transformation ist eindeutig, weil die Einsetzung ist es nicht.

3.1.1 Erhaltungsgrößen

Wenn die Hamiltonfunktion nicht von einer kanonischen Koordinate q_i abhängt, ist der entsprechende Impuls erhalten:

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = 0\ , \qquad p_i = const$$

Man kann dann die Hamiltonfunktion als Funktion von $2s-2$ unabhängigen Variablen betrachten. Das heißt, eine Erhaltungsgröße führt unmittelbar zur Vereinfachung des Systems. Wäre die Hamiltonfunktion von s Koordinaten unabhängig, könnte man das Problem einfach lösen: die kanonischen Impulse sind zeitunabhängig, und die kanonische Koordinaten sind lineare Funktionen von Zeit.

3.1.2 Einfache Beispiele

Das Hamilton-Formalismus lässt sich in dem folgenden Schema zusammenfassen:

1. Generalisierte Koordinaten festlegen:

$$\vec{q} = (q_1, \ldots, q_s)$$

2. Transformationsgleichungen aufstellen: für Teilchen $i = 1, ...N$

$$\vec{r}_i = \vec{r}_i(\vec{q}, t)$$
$$\dot{\vec{r}}_i = \dot{\vec{r}}_i(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t)$$

3. Kinetische und potentielle Energie in den Teilchenkoordinaten formulieren, dann $\vec{r}_i$ und $\dot{\vec{r}}_i$ einsetzen:

$$L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = T(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) - U(\vec{q}, t)$$

4. Generalisierte Impulse berechnen:

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \qquad \Rightarrow p_j = p_j(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t), \qquad j = 1, \ldots, s$$

5. Auflösen nach $\dot{q}_j$:

$$\dot{q}_j = \dot{q}_j(\vec{q}, \vec{p}, t) \qquad j = 1, \ldots, s$$

6. Lagrange-Funktion:

$$L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}(\vec{q}, \vec{p}, t), t) = \tilde{L}(\vec{q}, \vec{p}, t)$$

7. Legendre-Transformation

$$H(\vec{q}, \vec{p}, t) = \sum_{j=1}^{s} p_j \dot{q}_j(\vec{q}, \vec{p}, t) - \tilde{L}(\vec{q}, \vec{p}, t)$$

8. Kanonische (Hamiltonische) Gleichungen:

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H(q,p,t)}{\partial q_i}, \qquad \dot{q}_i = \frac{\partial H(q,p,t)}{\partial p_i}.$$

Beispiel 3.4 *Ebenes Pendel*
Generalisierte Koordinate $q = \phi$, Lagrange-Funktion

$$L = \frac{1}{2} m l^2 \dot{q}^2 + mgl \cos q\ .$$

Der generalisierte Impuls

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = ml^2 \dot{q} \qquad \Rightarrow \dot{q} = \frac{p}{ml^2}$$

Dies setzen wir in $L(q,\dot{q})$ ein:

$$\tilde{L}(q,p) = \frac{p^2}{2ml^2} + mgl\cos q$$

und führen damit die Legendre-Transformation durch:

$$H = p\dot{q} - L = \frac{p^2}{ml^2} - \tilde{L}(q,p) = \frac{p^2}{2ml^2} - mgl\cos q$$

Die Hamiltonischen Bewegungsgleichungen

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{ml^2} \qquad \Rightarrow \qquad \dot{p} = ml^2\ddot{q}$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -mgl\sin q$$

ergeben zusammengesetzt die bekannte Schwingungsgleichung

$$\ddot{q} + \frac{g}{l}\sin q = 0\ .$$

Beispiel 3.5 *Harmonischer Oszillator (Masse + Feder)*
Die Lagrange-Funktion

$$L = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}kq^2$$

Wir ersetzen in der letzten Gleichung $\dot{q}$ durch den generalisierten Impuls

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q}\ .$$

Mit

$$\tilde{L}(q,p) = \frac{p}{2m} - \frac{1}{2}kq^2$$

finden wir die Hamilton-Funktion $H = p\dot{q} - \tilde{L}(q,p)$ des harmonischen Oszillators:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 q^2\ , \qquad \omega_0^2 = k/m\ .$$

Das System ist konservativ, wegen $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$ folgt $H = E = const.$ Die Gleichung umschreiben wir als

$$\frac{p^2}{2mE} + \frac{q^2}{2E/m\omega_0^2} = 1\ ,$$

so ergibt sich die Gleichung einer Ellipse.

3.2 Poisson-Klammer

Wir betrachten zwei Größen, die von kanonischen Variablen abhängig sind: $F(q,p,t)$ und $G(q,p,t)$. Die Poisson-Klammer wird durch

$$[F,G] = \sum_1^s \left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial G}{\partial q_i} \right)$$

definiert. Die Poisson-Klammer ist wieder eine Funktion von kanonischen Variablen und Zeit. Aus der Definition folgt sofort

$$[F,G] = -[G,F], \qquad [F,F] = 0$$

Für die einfachste Funktionen erhalten wir

$$F = q_k,\ G = q_l \quad \Rightarrow \quad [q_k, q_l] = 0$$

$$F = p_k,\ G = p_l \quad \Rightarrow \quad [p_k, p_l] = 0$$

$$F = q_k,\ G = p_l \quad \Rightarrow \quad [q_k, p_l] = \delta_{kl}$$

Berechnen wir nun die Zeitabhängigkeit einer beliebigen physikalischen Größe $F(q,p,t)$, wobei q,p kanonische Gleichungen erfüllen:

$$\frac{dF}{dt} = \sum \left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{dp_i}{dt} \right) + \frac{\partial F}{\partial t} = \sum \left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial F}{\partial t} = \frac{\partial F}{\partial t} + [F,H]$$

Diese Gleichung hat zwei Folgen:
1) Die Bewegungsgleichungen können mit Hilfe von Poisson-Klammern als

$$\dot{p} = [p,H], \qquad \dot{q} = [q,H]$$

geschrieben werden.
2) Für die Erhaltungsgrößen gilt

$$F(p,q) = const \qquad \Leftrightarrow \qquad [F,H] = 0$$

Für drei beliebige Größen A, B, C beweist man die Jacobische Identität:

$$[[A,B],C] + [[B,C],A] + [[C,A],B] = 0$$

Diese Identität hat eine wichtige Folge: Die Poisson-Klammer aus zwei Bewegungsintegralen F_1, F_2 ist wieder ein Bewegungsintegral. Wir schreiben

$$[[F_1,F_2],H] = -[[F_2,H]F_1] + [[F_1,H]F_2] = 0$$

Beispiel 3.6 *Drehimpuls* $\vec{L} = \vec{q} \times \vec{p}$
Stellen wir die Drehimpulskomponenten dar

$$L_1 = q_2 p_3 - p_2 q_3, \qquad L_2 = p_1 q_3 - q_1 p_3, \qquad L_3 = q_1 p_2 - p_1 q_2$$

und berechnen die Poisson-Klammer

$$[L_1, L_2] = \frac{\partial L_1}{\partial q_3}\frac{\partial L_2}{\partial p_3} - \frac{\partial L_1}{\partial p_3}\frac{\partial L_2}{\partial q_3} = q_1 p_2 - q_2 p_1 = L_3$$

Das bedeutet, daß die Erhaltung von zwei Komponenten des Drehimpulses auch Erhaltung der dritten Komponente erzwingt.

Man kann die Poisson-Klammern benutzen, um die neue Bewegungsintegrale zu finden; manchmal aber erhält man wieder alte Erhaltungsgrößen oder z.B. Null.

3.3 Der Phasenraum und der Satz von Liouville

Der Phasenraum ist eine natürliche Form von Darstellung der Bewegungen in Hamiltonschen Systemen, weil sie Systeme gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung sind. Also können wir jedem Zustand einen Punkt in einem abstrakten, $2n$-dimensionalen Raum zuordnen, der durch $2n$ kartesischen Koordinatenachsen für die Größen q_i und p_i aufgespannt wird.

Bemerkung: In der Theorie der Differentialgleichungen kann man für jedes System von Differentialgleichungen den Phasenraum konstruieren. In der theoretischen Physik aber wird nur der Raum kanonischer Variablen Phasenraum genannt.

Wir diskutieren jetzt die allgemeinen Eigenschaften der Phasenraumdynamik. Für ein System mit n Freiheitsgraden hat man den Phasenraum mit $2n$ Dimensionen. Wenn das System autonom (zeitunabhängig) ist, ist die Energie erhalten. Deshalb findet die Bewegung auf einer $2n-1$-dimensionale Oberfläche $H(p, q) = E$ statt.

3.3.1 Der Liouvillesche Satz

Das Phasenvolumen ist erhalten. Diese Erhaltungsgröße ist nicht das übliche Bewegungsintegral, weil das Volumen keine Funktion von kanonischen Koordinaten ist.

Wir leiten erst die Formel für Volumenänderung für eine beliebige System von Differentialgleichungen her:

$$\dot{x}_i = F_i(x)$$

Nehmen wir ein kleines Volumen

$$\Delta v = \Delta x_1 \Delta x_2 ... \Delta x_n$$

und leiten des nach der Zeit ab:

$$\frac{d\Delta v}{dt} = \frac{d\Delta x_1}{dt} \Delta x_2 ... \Delta x_n + ... + \Delta x_1 \Delta x_2 ... \frac{d\Delta x_n}{dt}$$

Wenn wir berücksichtigen, daß

$$\frac{d\Delta x_1}{dt} = F_1(x_1 + \Delta x_1, x_2, ..., x_n) - F_1(x_1, x_2, ..., x_n) = \frac{\partial F_1}{\partial x_1} \Delta x_1$$

ist, dann erhalten wir

$$\frac{d\Delta v}{dt} = (\frac{\partial F_1}{\partial x_1} + ... + \frac{\partial F_n}{\partial x_n}) \Delta v$$

Für das Hamiltonsche System

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

gilt

$$\frac{\partial F_1}{\partial x_1} + ... + \frac{\partial F_n}{\partial x_n} = \sum_i \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i} - \frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i} = 0$$

was den Liouvilleschen Satz beweist. Als eine Verallgemeinerung kann man auch den Erhaltung von Poincaré-Invarianten

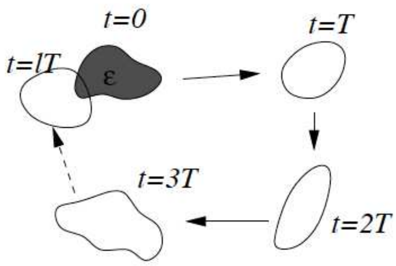
$$(\Delta v)^{(2)} = \Delta q_i \cdot \Delta p_i, \qquad (\Delta v)^{(4)} = \Delta q_i \cdot \Delta p_i \Delta q_j \cdot \Delta p_j, ...$$

beweisen.

3.3.2 Der Poincarésche Satz

Dieser "Wiederkehrsatz" bestimmt die allgemeinen Wiederholungseigenschaften der mechanischen Bewegung. Sei der Phasenraum kompakt, d. h. er hat ein beschränktes Volumen. Z. B. man kann sich die Teilchen mit Wechselwirkung in einem Kasten vorstellen; weil die Energie erhalten ist, ist das Phasenvolumen begrenzt. Die Frage kann man so formulieren: wenn die Bewegung von der Anfansbedingungen q_i^0, p_i^0 anfängt, kann man irgendwo wieder diesen oder fast diesen Zustand beobachten? Die Antwort ist: diese Rückkehr wird für fast alle Anfangsbedingungen beobachtet.

Um dies zu Beweisen, nehmen wir an, daß es eine Menge von Anfangsbedingungen gibt, die nicht zurückkehren, und diese Menge hat das Volumen ε. Nehmen wir einen größen Zeitabstand T und betrachten dieses Anfangsvolumen zur Zeiten T, $2T$,.... Entsprechend Liouvilleschen Satz ist das Volumen ε erhalten, deshalb ist es unmöglich, daß sich keine von Mengen zur Zeiten T, $2T$, ... schneiden. Wenn es aber eine Schneidung zur Zeit kT gibt (d.h. die Menge kT schneidet die Menge nT für irgendwelche $n > k$), dann gibt auch eine Schneidung zur Zeit $(k-1)T$ etc, also auch eine Schneidung für $k = 0$. Das aber widerspricht unsere Einnahme, und der Satz ist bewiesen.



Folge: wenn alle Teilchen eines Gases zur Zeit $t = 0$ in einem kleinem Abteil des Kasten sich finden, dann wird diese Zustand irgendwann wieder beobachtet werden.

3.4 Kanonische Transformationen

In der Lagrangeschen Mechanik kann man aus dem Hamiltonschen Variazionsprinzip die Invarianz von Lagrange-Gleichungen zu Variabletransformationen

$$Q_i = Q_i(q)$$

herleiten. In der Hamiltonschen Mechanik benutzen wir eine andere Form vom Hamilton-Prinzip, um mehr allgemeine kanonische Transformationen zu erhalten.

3.4.1 Prinzip der stationären Wirkung

Das Prinzip der stationären Wirkung lautet

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} (p\dot{q} - H) = 0$$

Wir betrachten jetzt S als ein Funktional der $2n$ unabhängigen Koordinaten q und p mit Randbedingungen $\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$, $\delta p(t_1) = \delta p(t_2) = 0$. Dann können wir schreiben

$$\delta S(q,p) = \int_{t_1}^{t_2} dt(\delta p \cdot \dot{q} + p\delta\dot{q} - \frac{\partial H}{\partial p}\delta p - \frac{\partial H}{\partial q}\delta q) = 0$$

Wenn wir $p\delta\dot{q}$ durch partielle Integration zu $-\dot{p}\delta q$ umformen, erhalten wir

$$\delta S(q,p) = \int_{t_1}^{t_2} dt(\delta p(\dot{q} - \frac{\partial H}{\partial p}) - \delta q(\dot{p} + \frac{\partial H}{\partial q})) = 0$$

was die Hamiltonschen Gleichungen ergibt.

Machen wir jetzt eine Transformation zu neuen Variablen

$$q_i, p_i \quad \rightarrow \quad Q_i, P_i$$

mit der Bedingung, daß die Bewegungsgleichungen in neuen Koordinaten auch Hamiltonsche Gleichungen sind, eventuell mit neuen Hamiltonfunktion $\tilde{H}$. Das heißt, daß nach dem Prinzip der stationären Wirkung gilt

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (p\dot{q} - H)\, dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} (P\dot{Q} - \tilde{H})\, dt$$

Diese Bedingung ist erfüllt, falls die Integranden sich um die totale Zeitableitung einer beliebigen Funktion unterscheiden:

$$\sum_i p_i\dot{q}_i - H(q,p,t) = \sum_i P_i\dot{Q}_i - \tilde{H}(Q,P,t) + \frac{d}{dt}F(q,p,Q,P,t)$$

Wir zeigen jetzt, daß es genügt, die Funktion F als eine Funktion von $2n$ Variablen (teilweise alten, teilweise neuen) und der Zeit zu haben, um die Transformation zu definieren. Die Funktion wird Erzeugende genannt.

1) Wir betrachten zuerst die Möglichkeit $F = F_1(q,Q,t)$ und setzen

$$\frac{d}{dt}F_1(q,Q,t) = \frac{\partial F_1}{\partial t} + \sum \frac{\partial F_1}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i}\dot{Q}_i$$

in die allgemeine Gleichung an. Durch Koeffizientenvergleich erhalten wir

$$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i}, \qquad P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}, \qquad \tilde{H} = H + \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

Dies sind $2n$ Gleichungen, die Beziehung zwischen alten und neuen Variablen vollständig definieren.

2) Es gibt auch eine andere Möglichkeit, die Variablen in der Erzeugenden zu definieren, nämlich alte Koordinaten und neue Impulse:

$$F = F_2(q, P, t)$$

Dann ist die totale Ableitung nach Zeit

$$\frac{dF_2}{dt} = \frac{\partial F_2}{\partial t} + \sum \frac{\partial F_2}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F_2}{\partial P_i}\dot{P}_i$$

Wenn wir die Bedingung für kanonische Transformation als

$$\sum(p_i - \frac{\partial F_2}{\partial q_i})\dot{q}_i - H = \sum(-Q_i + \frac{\partial F_2}{\partial P_i})\dot{P}_i - \tilde{H} + \frac{\partial F_2}{\partial t} + \frac{d}{dt}(\sum Q_i P_i)$$

umschreiben, dann erhalten wir die kanonische Transformation in der Form

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}, \quad Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i}, \quad \tilde{H} = H + \frac{\partial F_2}{\partial t}$$

Auch die Erzeugenden $F_3(p, Q, t)$ und $F_4(p, P, t)$ werden benutzt.

Beispiel 3.7 *Kanonische Transformation 1 Sei*

$$F_1 = \sum q_i Q_i$$

dann

$$p_i = Q_i, \qquad P_i = -q_i$$

Das Beispiel zeigt, daß beim Hamilton-Formalismus Impuls und Ortskoordinate völlig gleichwertige Rollen spielen.

Beispiel 3.8 *Kanonische Transformation 2 Betrachten wir den harmonischen Oszillator mit der Hamilton-Funktion*

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{kq^2}{2}$$

Wir versuchen die Amplitude und die Phase als neue Koordinaten nehmen, also

$$q = A\sin\phi \qquad p = bA\cos\phi$$

Wir schreiben $A = P$ und $\phi = Q$, und suchen die Erzeugende $F_1(q, Q)$. Es soll gelten

$$p = \frac{\partial F_1}{\partial q} = bP\cos Q = bq\frac{\cos Q}{\sin Q}$$

Die Integration ergibt

$$F_1 = bq^2 \frac{\cos Q}{\sin Q}$$

Wenn wir jetzt die Amplitude berechnen, dann erhalten wir

$$P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} = bq^2 \frac{1}{\sin^2 Q}$$

was mit unserer Annahme nicht übereinstimmt:

$$q = \sqrt{P/b} \sin Q$$

Das bedeutet, daß nicht die Amplitude A, sondern das Quadrat A^2 die kanonische Variable sein muß. Also aus der Erzeugenden

$$F_1 = bq^2 \frac{\cos Q}{\sin Q}$$

erhalten wir

$$P = b\frac{q^2}{\sin^2 Q}, \quad p = 2bq\frac{\cos Q}{\sin Q}$$

Wählen wir $b = \sqrt{km}/2$, dann erhalten wir

$$\tilde{H} = H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kq^2}{2} = \omega P$$

wobei $\omega = \sqrt{k/m}$. Das bedeutet, daß Q eine zyklische Koordinate ist. Die Bewegungsgleichungen lauten

$$\dot{P} = 0, \qquad \dot{Q} = \omega$$

und die Lösung ist

$$P = const, \qquad Q = \omega t + Q_0$$

Beispiel 3.9 *Kanonische Transformation 3 Sei*

$$F_2 = \sum q_i P_i$$

dann

$$p_i = P_i, \qquad Q_i = q_i$$

und wir erhalten eine identische Transformation. Betrachten wir eine fast identische Transformation mit der Erzeugenden

$$F_2 = \sum q_i P_i + \varepsilon G(q, P)$$

Dann lautet die Transformation

$$p_i = P_i + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial q_i}, \qquad Q_i = q_i + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial P_i}$$

Nehmen wir $G(q, P) = H(q, P)$*, dann*

$$Q_i = q_i + \varepsilon \frac{\partial H(q, P)}{\partial P_i}, \qquad P_i = p_i - \varepsilon \frac{\partial H(q, P)}{\partial q_i}$$

Wenn wir auch $\varepsilon = dt$ *nehmen, dann erhalten wir im Grenzwert* $dt \to 0$ *genau die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen:*

$$q_i(t+dt) = q_i(t) + dt \frac{\partial H(q(t), p(t+dt))}{\partial p_i}, \qquad p_i(t+dt) = p_i(t) - dt \frac{\partial H(q(t), p(t+dt))}{\partial q_i}$$

Für

$$H = \sum \frac{p_i^2}{2m_i} + V(q_1, ..., q_n)$$

erhalten wir

$$q_i(t+dt) = q_i(t) + dt \frac{p_i(t+dt)}{m_i}$$

$$p_i(t+dt) = p_i(t) - dt \frac{\partial V(q(t))}{\partial q_i}$$

Dieses Gleichungssystem ist einfach lösbar (erst sollen die neue Impulse aus Gl. 2 gefunden werden, und dann die neue Koordinaten). Diese kanonische Transformation liefert ein numerisches Schema zur Lösung von Hamiltonschen Gleichungen. Der Vorteil ist, daß mehrere Eigenschaften bei diesem Schema automatisch erfüllt werden, z. B. der Liouvillesche Satz.