

2.1	Legendre-Transformation	106
2.1.1	Aufgaben	109
2.2	Kanonische Gleichungen	110
2.2.1	Hamilton-Funktion	110
2.2.2	Einfache Beispiele	114
2.2.3	Aufgaben	120
2.3	Wirkungsprinzipien	123
2.3.1	Modifiziertes Hamilton'sches Prinzip	123
2.3.2	Prinzip der kleinsten Wirkung	127
2.3.3	Fermat'sches Prinzip	131
2.3.4	Jacobi-Prinzip	132
2.4	Poisson-Klammer	136
2.4.1	Darstellungsräume	136
2.4.2	Fundamentale Poisson-Klammern	141
2.4.3	Formale Eigenschaften	144
2.4.4	Integrale der Bewegung	146
2.4.5	Bezug zur Quantenmechanik	148
2.4.6	Aufgaben	150
2.5	Kanonische Transformationen	153
2.5.1	Motivation	153
2.5.2	Die erzeugende Funktion	158
2.5.3	Äquivalente Formen der erzeugenden Funktion	162

2.5.4	Beispiele kanonischer Transformationen	165
2.5.5	Kriterien für Kanonizität	169
2.5.6	Aufgaben	172
	Kontrollfragen	176

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit einer

- ▶ formalen Weiterentwicklung der Theorie der Klassischen Mechanik.

Dabei geht es eigentlich nicht so sehr um die Konstruktion neuer Rechenhilfsmittel. Auch bringt die Hamilton-Formulierung der Klassischen Mechanik *keine neue* Physik. Ihr Gültigkeits- und Anwendungsbereich entspricht nämlich ziemlich genau dem der Lagrange-Formulierung. Es geht vielmehr darum, eine tiefere Einsicht in die formale mathematische Struktur der physikalischen Theorie zu gewinnen, und dies durch Untersuchung aller denkbaren Umformulierungen der fundamentalen Prinzipien. Hinzu kommt, dass die Klassische Mechanik wie jede physikalische Theorie nur einen beschränkten Gültigkeitsbereich besitzt. Es ist jedoch nicht „*a priori*“ klar, welche Darstellung für spätere Verallgemeinerungen besonders günstig ist. Begriffsbildungen und mathematische Zusammenhänge des Hamilton-Formalismus werden sich als hilfreich für einen Anschluss an die Gesetzmäßigkeiten der Quantenmechanik erweisen. Das ist letztlich das entscheidende Motiv für die Beschäftigung mit der Hamilton-Mechanik.

Wir wollen einmal in einer gewissen „Bestandsaufnahme“ die bisher kennen gelernten Konzepte gegenüberstellen. Die *Newton-Mechanik* stellt ein sehr allgemeines Konzept dar. Es sind alle Typen von Kräften zugelassen. Die Lösungen der Bewegungsgleichungen manifestieren sich sehr anschaulich als *Teilchenbahnen*. Die Newton-Mechanik ist allerdings nur in Inertialsystemen gültig. In nicht-inertialen Systemen müssen passende *Scheinkräfte* eingeführt werden. Die „unhandlichen“ Zwangskräfte müssen explizit in den Bewegungsgleichungen berücksichtigt werden. Ferner stellen sich die Newton-Gleichungen als nicht forminvariant gegenüber Koordinatentransformationen heraus.

Die *Lagrange-Mechanik* ist dagegen in allen Koordinatensystemen gültig. Ihr besonderer Vorteil liegt darin, dass die „unhandlichen“ Zwangskräfte eliminiert sind. Die Lagrange'schen Bewegungsgleichungen erweisen sich als forminvariant unter Punkttransformationen. Sie werden aus fundamentalen Prinzipien, dem Differentialprinzip von d'Alembert oder dem Integralprinzip von Hamilton, abgeleitet, die die Newton'schen Axiome ersetzen. In holonomen, konservativen Systemen handelt es sich dabei um S Differentialgleichungen 2. Ordnung für S generalisierte Koordinaten q_1, \dots, q_S , zu deren Lösung $2S$ Anfangsbedingungen vonnöten sind. Da es sich bei den generalisierten Koordinaten um beliebige physikalische Größen handeln kann, also nicht notwendig um *Längen*, werden die Lösungen der Bewegungsgleichungen entsprechend unanschaulich. Sie ergeben erst nach Rücktransformation auf die Teilchenkoordinaten $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ die klassischen *Teilchenbahnen*. Darin kann man einen gewissen Nachteil sehen, ebenso wie in der Tatsache, dass es kein einheitliches Konzept für die Behandlung aller denkbaren Typen von Zwangsbedingungen gibt.

Die nun zu besprechende *Hamilton-Mechanik* soll eine Brücke zwischen den klassischen und den nichtklassischen Theorien (Quantenmechanik, Statistische Mechanik) schlagen.

Das wichtigste Ergebnis wird die Erkenntnis sein, dass Klassische Mechanik und Quantenmechanik als verschiedene Realisierungen ein und derselben übergeordneten, abstrakten mathematischen Struktur aufgefasst werden können. – Beim Übergang von der Lagrange- zur Hamilton-Formulierung werden generalisierte Geschwindigkeiten durch generalisierte Impulse ersetzt:

$$(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) \Rightarrow (\mathbf{q}, \mathbf{p}, t).$$

\mathbf{q} und \mathbf{p} werden als voneinander unabhängige Variable aufgefasst. Das Resultat dieser Transformationen werden $2S$ Differentialgleichungen **erster** Ordnung für S generalisierte Koordinaten q_1, \dots, q_S und S generalisierte Impulse p_1, \dots, p_S sein. Die Zahl der zur Lösung benötigten Anfangsbedingungen bleibt damit bei $2S$. – Als Methode für den Koordinatenwechsel wird eine so genannte *Legendre-Transformation* gewählt, deren Technik im nächsten Abschnitt vorgestellt werden soll.

2.1 Legendre-Transformation

Wir diskutieren als Einschub ein für die Theoretische Physik wichtiges mathematisches Verfahren zur Variablentransformation:

Gegeben sei eine Funktion $f = f(x)$ mit dem Differential

$$df = \frac{df}{dx} dx = u dx.$$

Gesucht sei eine Funktion $g = g(u)$, für die

$$\frac{dg}{du} = \pm x$$

gilt. Diese findet man leicht wie folgt:

$$\begin{aligned} df &= u dx = d(ux) - x du \\ \Rightarrow d(f - ux) &= -x du \Rightarrow \frac{d}{du}(f - ux) = -x. \end{aligned}$$

Man definiert deshalb:

Legendre-Transformierte von $f(x)$

$$g(u) = f(x) - ux = f(x) - x \frac{df}{dx}. \quad (2.1)$$

Warum vollzieht man die Variablentransformation nicht einfach „durch Einsetzen“? An dem folgenden Beispiel kann man sich klar machen, dass diese nicht reversibel wäre. Die Transformation

$$\frac{df}{dx} = u(x) \Rightarrow x = x(u) \Rightarrow \tilde{f}(u) = f(x(u))$$

würde zum Beispiel bedeuten, dass die Funktionen

$$f(x) = \alpha x^2 \quad \text{und} \quad \tilde{f}(x) = \alpha(x+c)^2$$

dasselbe $\tilde{f}(u)$ haben:

$$\left. \begin{aligned} u &= \frac{df}{dx} = 2\alpha x \\ \tilde{u} &= \frac{d\tilde{f}}{dx} = 2\alpha(x+c) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left. \begin{aligned} x &= \frac{u}{2\alpha} \\ x &= \frac{\tilde{u}}{2\alpha} - c \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{aligned} \tilde{f}(u) &= \frac{u^2}{4\alpha} \\ \tilde{f}(\tilde{u}) &= \frac{\tilde{u}^2}{4\alpha} \end{aligned}$$

Die Rücktransformation kann also nicht eindeutig sein. Eine Legendre-Transformation ist dagegen eindeutig, wie das folgende Schema verdeutlicht:

$$\begin{array}{ccc} f(x) & = & g(u) - u \frac{dg}{du} \\ \downarrow & & \uparrow \\ x = x(u) \leftarrow u = \frac{df}{dx} & & -x = \frac{dg}{du} \rightarrow u = u(x) \\ \downarrow & & \uparrow \\ f(x) - x \frac{df}{dx} & = & g(u) \end{array} \quad (2.2)$$

Offensichtlich ist dieses Schema nur anwendbar, wenn noch

$$\frac{d^2f}{dx^2} \neq 0 \quad (2.3)$$

gilt. Nur dann kann u wirklich eine Variable sein. Aus $(d^2f)/(dx^2) = 0$ würde nämlich $(df)/(dx) = u = \text{const}$ folgen. In dem obigen Schema (2.2) gibt es keinen ausgezeichneten Punkt. Die Rücktransformation ist deshalb eindeutig.

Wir wollen die Theorie auf Funktionen zweier Variabler ausdehnen. Gegeben sei

$$f = f(x, y) \Rightarrow df = u(x, y) dx + v(x, y) dy,$$

wobei gilt:

$$u(x, y) = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_y, \quad v(x, y) = \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)_x. \quad (2.4)$$

Gesucht wird

$$g = g(x, v) \Rightarrow dg = u dx - y dv$$

mit

$$u(x, y(x, v)) = \left(\frac{\partial g}{\partial x} \right)_v, \quad y(x, v) = - \left(\frac{\partial g}{\partial v} \right)_x. \quad (2.5)$$

Man bezeichnet x als die *passive*, y als die *aktive* Variable. Die gesuchte Funktion $g(x, v)$ findet man wie folgt:

$$\begin{aligned} df &= u dx + v dy = u dx + d(vy) - y dv \\ &\Rightarrow d(f - vy) = u dx - y dv \\ &\Rightarrow \left(\frac{\partial(f - vy)}{\partial x} \right)_v = u, \quad \left(\frac{\partial(f - vy)}{\partial v} \right)_x = -y. \end{aligned}$$

Man definiert nun:

Legendre-Transformierte

$$g(x, v) = f(x, y) - vy = f(x, y) - y \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)_x \quad (2.6)$$

von $f(x, y)$ bezüglich y .

Das Transformationsschema (2.2) ist nur leicht abzuändern:

$$\begin{array}{ccc} f(x, y) & = & g(x, v) - v \left(\frac{\partial g}{\partial v} \right)_x \\ \downarrow & & \uparrow \\ y = y(x, v) \leftarrow v = \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)_x & & -y = \left(\frac{\partial g}{\partial v} \right)_x \rightarrow v = v(x, y) \\ \swarrow & & \uparrow \\ f(x, y) - y \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)_x & = & g(x, v) \end{array} \quad (2.7)$$

Die Verallgemeinerung des Verfahrens auf mehr als zwei Variable liegt auf der Hand.

2.1.1 Aufgaben

Aufgabe 2.1.1

Bestimmen Sie die Legendre-Transformierte

1. $g(u)$ der Funktion $f(x) = \alpha x^2$,
2. $g(x, v)$ der Funktion $f(x, y) = \alpha x^2 y^3$.

Aufgabe 2.1.2

Bestimmen Sie die Legendre-Transformierte

1. $g(u)$ der Funktion $f(x) = \alpha(x + \beta)^2$ (α, β : Konstante)
2. $g(x, v)$ der Funktion

$$f(x, y) = \alpha x^3 y^5.$$

Führen Sie zur Kontrolle die Rücktransformation durch.

Aufgabe 2.1.3

Eine häufige Anwendung findet die Legendre-Transformation in der Thermodynamik (s. Bd. 4 dieses Grundkurses), z. B. bei der Berechnung und Verwendung von „*thermodynamischen Potentialen*“. Bei diesen handelt es sich um Energiegrößen, die in ihren sog. „*natürlichen Variablen*“ nützliche, spezielle Eigenschaften aufweisen. Die „*innere Energie*“ eines Gases U , z. B., besitzt die natürlichen Variablen Entropie S und Volumen V . Eine Änderung der inneren Energie berechnet sich nach

$$dU = TdS - pdV.$$

p ist der Druck und T die Temperatur des Gases. Da S und V nicht immer optimale Variablen im Hinblick auf experimentelle Vorgaben sind, werden alternative Potentiale ins Spiel gebracht:

1. freie Energie: $F = F(T, V)$
2. Enthalpie: $H = H(S, p)$
3. freie Enthalpie: $G = G(T, p)$

Diese unterscheiden sich voneinander und von U durch passende Legendre-Transformationen. Stellen Sie die Zusammenhänge von F , H , G mit U dar und

bestimmen Sie die partiellen Ableitungen dieser Potentiale nach ihren natürlichen Variablen!

2.2 Kanonische Gleichungen

2.2.1 Hamilton-Funktion

Wir transformieren die Lagrange-Funktion,

$$L = L(q_1, \dots, q_S, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_S, t),$$

mit den $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_S$ als aktive Variable, die durch die generalisierten Impulse

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, \quad i = 1, \dots, S$$

ersetzt werden sollen. Die negative Legendre-Transformierte ist nichts anderes als die bereits in (1.169) kennen gelernte

Hamilton-Funktion

$$H(q_1, \dots, q_S, p_1, \dots, p_S, t) = \sum_{i=1}^S p_i \dot{q}_i - L(q_1, \dots, q_S, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_S, t). \quad (2.8)$$

Wir haben in Abschn. 1.4.1 gesehen, dass sie in enger Beziehung zur Energie des Systems steht. Wir wollen zunächst die aus der Hamilton-Funktion H folgenden Bewegungsgleichungen ableiten. Dazu bilden wir das totale Differential

$$\begin{aligned} dH &= \sum_{i=1}^S (dp_i \dot{q}_i + p_i d\dot{q}_i) - \sum_{i=1}^S \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i \right) - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= \sum_{i=1}^S \left(\dot{q}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i \right) - \frac{\partial L}{\partial t} dt. \end{aligned}$$

Wir nutzen noch die Lagrange'schen Bewegungsgleichungen aus:

$$dH = \sum_{i=1}^S (\dot{q}_i dp_i - \dot{p}_i dq_i) - \frac{\partial L}{\partial t} dt. \quad (2.9)$$

Andererseits gilt natürlich auch:

$$dH = \sum_{i=1}^S \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i \right) + \frac{\partial H}{\partial t} dt . \quad (2.10)$$

Da q_i, p_i, t unabhängige Koordinaten sind, folgt aus dem direkten Vergleich von (2.9) und (2.10):

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} , \quad i = 1, \dots, S , \quad (2.11)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} , \quad i = 1, \dots, S , \quad (2.12)$$

$$-\frac{\partial L}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t} . \quad (2.13)$$

Dies sind die

- ▶ Hamilton'schen Bewegungsgleichungen,

die man auch die

- ▶ Kanonischen Gleichungen

nennt. Das sind $2S$ Bewegungsgleichungen, von 1. Ordnung in der Zeit, die an die Stelle der S Lagrange-Gleichungen treten, die von 2. Ordnung sind. Man beachte die hohe Symmetrie der Gleichungen bezüglich der q_i und der p_i . Sie beschreiben die Bewegung des Systems im abstrakten $2S$ -dimensionalen

- ▶ Phasenraum,

der durch die Variablen q_i und p_i aufgespannt wird.

Wir sollten uns noch etwas mit der physikalischen Bedeutung der Hamilton-Funktion beschäftigen. Dazu erinnern wir uns an die allgemeine Gestalt (1.41) der Lagrange-Funktion L :

$$L = T - V = L_2 + L_1 + L_0 .$$

Die L_i sind dabei homogene Funktionen der generalisierten Geschwindigkeiten \dot{q}_j vom Grad i (1.45). Dies bedeutet (s. (1.171)):

$$\sum_{j=1}^S \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \dot{q}_j = 2L_2 + L_1 . \quad (2.14)$$

Aus (2.8) folgt dann für die Hamilton-Funktion:

$$H = L_2 - L_0 . \quad (2.15)$$

Sie enthält also nicht den Term L_1 . Bei **skleronomen Zwangsbedingungen** (genauer bei $\partial \mathbf{r}_i / \partial t \equiv 0$) sind nach (1.38) und (1.39) $\alpha = \alpha_j = 0$. Dies bedeutet:

$$L_0 = -V, \quad L_1 = 0, \quad L_2 = T. \quad (2.16)$$

H ist dann mit der Gesamtenergie identisch:

$$H = T + V = E. \quad (2.17)$$

Wegen des fehlenden Terms L_1 gilt das nicht mehr bei **rheonomen Zwangsbedingungen**, die zu $\partial \mathbf{r}_i / \partial t \neq 0$ führen.

Für das totale Zeitdifferential von H finden wir:

$$\frac{dH}{dt} = \sum_{j=1}^s \left\{ \frac{\partial H}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial H}{\partial p_j} \dot{p}_j \right\} + \frac{\partial H}{\partial t} = \sum_{j=1}^s \left\{ \frac{\partial H}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} \right\} + \frac{\partial H}{\partial t}.$$

Totale und partielle Ableitungen von H nach der Zeit sind also identisch:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}. \quad (2.18)$$

H ist demnach ein *Integral der Bewegung*, falls keine explizite Zeitabhängigkeit vorliegt:

$$H = \text{const} \Leftrightarrow \frac{\partial H}{\partial t} = 0. \quad (2.19)$$

Nach (2.17) ist dies der Energiesatz, falls keine rheonomen Zwangsbedingungen vorliegen. Ist dies doch der Fall, so ist $L_1 \neq 0$ und damit H nicht die Gesamtenergie.

Der Hamilton-Formalismus wird insbesondere dann vorteilhaft, wenn zyklische Koordinaten vorliegen. Wir erinnern uns:

$$q_j \text{ zyklisch} \Leftrightarrow \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0 \Leftrightarrow p_j = \text{const} = c_j. \quad (2.20)$$

Dies bedeutet aber auch

$$\dot{p}_j = 0 = -\frac{\partial H}{\partial q_j}, \quad (2.21)$$

sodass eine zyklische Koordinate q_j auch in H nicht erscheint. Der zugehörige Impuls $p_j = c_j$ ist keine echte Variable, sondern durch Anfangsbedingungen festgelegt. H enthält nur noch $(2S-2)$ Variable, die Zahl der Freiheitsgrade hat praktisch von S auf $(S-1)$ abgenommen:

$$H = H(q_1, \dots, q_{j-1}, q_{j+1}, \dots, q_S, p_1, \dots, p_{j-1}, p_{j+1}, \dots, p_S, t | c_j). \quad (2.22)$$



<http://www.springer.com/978-3-642-41979-9>

Grundkurs Theoretische Physik 2

Analytische Mechanik

Nolting, W.

2014, XIII, 370 S. 86 Abb., 16 Abb. in Farbe. Book +

eBook., Softcover

ISBN: 978-3-642-41979-9