Theoretische Physik – Mechanik

Inhaltsverzeichnis

1 Grundlagen **1**

1.1 Die Newtonschen Axiome 1

1.2 Koordinatensysteme 2

1.3 Verallgemeinerte Koordinaten 3

1.4 Zwangsbedingungen 3

1.5 Ausführliches Beispiel: schiefe Ebene 4

2 Der Lagrange-Formalismus **6**

2.1 Das d'Alembertsche Prinzip 6

2.2 Herleitung der Lagrange-Gleichungen 7

2.3 Beispiele 10

2.4 Forminvarianz der Lagrange-Gleichungen 12

2.5 Lagrange-Formalismus mit Reibung 13

2.6 Lagrange-Gleichungen erster Art 17

3 Erhaltungssätze **20**

3.1 Kanonische Impulse 20

3.2 Zyklische Koordinaten und Erhaltungsgrößen 20

3.3 Impulserhaltung 21

3.4 Drehimpulserhaltung 21

3.5 Noether-Theorem 23

3.6 Energieerhaltung 25

4 Freie Schwingungen **27**

4.1 Linearisierung von Schwingungen 27

4.2 Schwingungen mit mehreren Freiheitsgraden 28

4.3 Beispiel: gekoppelte Oszillatoren 31

4.4 Hauptachsentransformation 33

5 Lineare Schwingungen mit äußerer Kraft **36**
5.1 Der freie gedämpfte harmonische Oszillator 36
5.2 Gedämpfter harmonischer Oszillator mit harmonischer externer Kraft 38
5.3 Allgemeine periodische Kraft – Fourierreihen 39
5.4 Nicht-periodische Kraft – Fouriertransformationen 42
5.5 Green-Funktionen 44
5.6 Die Diracsche Delta-Funktion 46

6 Zentralkräfte **47**
6.1 Das Zweikörperproblem 47
6.2 Bewegung im konservativen Zentralkraftfeld 48
6.3 Das Kepler-Problem 51

7 Beschleunigte Bezugssysteme **56**
7.1 Der total antisymmetrische Einheitstensor 56
7.2 Scheinkräfte in beschleunigten Bezugssystemen 58

8 Der Hamilton-Formalismus **61**
8.1 Die Legendre-Transformation 61
8.2 Die Hamiltonschen Gleichungen 62
8.3 Hamiltonfunktion und Energie 63

9 Das Hamiltonsche Prinzip **66**
9.1 Variationsrechnung 66
9.2 Das Hamiltonsche Prinzip 68

10 Die Poisson-Klammern **70**

11 Kanonische Transformationen **72**
11.1 Punkttransformation 72
11.2 Kanonische Transformationen 74
11.3 Die Erzeugende 76

12 Kanonische Invarianten **79**
12.1 Fundamentale Poisson-Klammern 79
12.2 Phasenvolumen 79

9 Das Hamiltonsche Prinzip

Das Hamiltonsche Prinzip liefert einen alternativen Weg zur Herleitung der Hamiltonschen Gleichungen und der Lagrange-Gleichung. Dafür nutzen wir die Variationsrechnung.

9.1 Variationsrechnung

Es sei eine Funktion

$$F = F\left(y(x), y'(x), x\right)$$

gegeben, wobei $y'(x) = dy/dx$ bezeichnet. Des Weiteren betrachten wir zwei Punkte $P_1 = (x_1, y_1)$ und $P_2 = (x_2, y_2)$. Das Integral

$$I = \int_{x_1}^{x_2} F\left(y(x), y'(x), x\right)\, dx$$

definiert ein *Funktional*. Unter einem Funktional versteht man eine Abbildung von einem Funktionenraum in die reellen Zahlen. Das Integral I weist jeder Funktion $y(x)$ einen Zahlenwert zu.

Die Aufgabenstellung der Variationsrechnung lautet nun, diejenigen Funktionen $y(x)$ mit $y(x_1) = y_1$ und $y(x_2) = y_2$ zu bestimmen, die das Integral I minimieren bzw. maximieren. Diese Aufgabenstellung ist verwandt mit der Differentialrechnung, jedoch wird dort lediglich ein Wert x_0 für eine Variable x gesucht, der eine Funktion extremal macht. In der Variationsrechnung jedoch wird nach einer *Funktion* gesucht, so dass ein *Funktional* extremal wird.

Begründet wurde die Variationsrechnung durch das sogenannte *Brachistochronen*-Problem, welches 1696 von Bernoulli formuliert wurde. Ein Massenpunkt m mit Anfangsgeschwindigkeit Null soll im Graviationsfeld (die Erdanziehungskraft wirke in positiver y-Richtung) reibungsfrei von P_1 nach P_2 laufen. Gesucht ist diejenige Zwangsfläche, für die die dazu benötigte Zeit t minimal wird. Die Zeit errechnet sich gemäß

$$t = \int_{P_1}^{P_2} \frac{ds}{v},$$

wobei ds ein infinitesimales Streckenelement bezeichnet, für das gilt

$$ds = \sqrt{(dx)^2 + (dy)^2} = \sqrt{1 + y'^2}\, dx,$$

und v die Geschwindigkeit, für die aufgrund des Energiesatzes gilt

$$\frac{m}{2} v^2 = mgy \quad \Longleftrightarrow \quad v = \sqrt{2gy}.$$

Damit ist
$$t = \frac{1}{\sqrt{2g}} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{1+y'^2}{y}}\, dx.$$
Gesucht ist diejenige Zwangsbedingung $y(x)$, die t minimiert.
Leonhard Euler (1707–1783) gelang es, das Problem der Variationsrechnung auf Differentialgleichungen zurückzuführen.
Wir bezeichnen die gesuchte Extremale mit $y(x)$. Wir betrachten nun benachbarte Kurven
$$\hat{y}(x) = y(x) + \varepsilon\, \eta(x),$$
wobei $\eta(x)$ differenzierbar sein und
$$\eta(x_1) = \eta(x_2) = 0 \tag{88}$$
gelten soll. Wir wählen eine beliebige Funktion $\eta(x)$, die nun festgehalten wird, und untersuchen die Abhängigkeit des Funktionals vom Parameter ε:
$$I_\eta(\varepsilon) = \int_{x_1}^{x_2} F(y + \varepsilon\eta, y' + \varepsilon\eta', x)\, dx.$$
Die Funktion $y(x)$ erteilt dem Integral I genau dann ein Extremum, wenn die I_η für *alle* Funktionen $\eta(x)$ bei $\varepsilon = 0$ ein Extremum haben. Eine notwendige Bedingung hierfür ist, dass die ersten Ableitungen verschwinden:
$$\left.\frac{dI_\eta}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=0} = \int_{x_1}^{x_2} \left[\eta\, \frac{\partial F}{\partial y} + \eta'\, \frac{\partial F}{\partial y'}\right] dx = 0.$$
Partielle Integration des zweiten Integranden ergibt
$$\left.\frac{dI_\eta}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=0} = \int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx}\frac{\partial F}{\partial y'}\right] \eta(x)\, dx + \left[\eta(x)\, \frac{\partial F}{\partial y'}\right]_{x_1}^{x_2} = 0.$$
Aufgrund der Randbedingungen (88) verschwindet der Randterm. Also ist
$$\int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx}\frac{\partial F}{\partial y'}\right] \eta(x)\, dx = 0$$
für alle Funktionen $\eta(x)$ die notwendige Bedingung dafür, dass $y(x)$ das Integral extremal macht. Dies ist aber genau dann für alle $\eta(x)$ erfüllt, wenn
$$\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx}\frac{\partial F}{\partial y'} = 0$$
ist.
Diese Überlegungen können einfach auf den Fall übertragen werden, dass die Funktion F von mehreren Funktionen $y_1(x), \ldots, y_n(x)$ und deren Ableitungen abhängt. Eine notwendige Bedingung für das Extremum des Integrals
$$I = \int_{x_1}^{x_2} F\left(y_1(x), \ldots, y_n(x), y_1'(x), \ldots, y_n'(x), x\right)\, dx$$

wird durch die sog. **Euler-Lagrange-Gleichungen**

$$\frac{d}{dx}\frac{\partial F}{\partial y_i'} - \frac{\partial F}{\partial y} = 0 \qquad\qquad i = 1, \ldots, n \tag{89}$$

gegeben.
Verändern wir die Funktionen $y_i(x)$ um kleine Variationen $\delta y_i(x)$, so ändert sich auch das Integral I. Diese Variation von I bezeichnen wir mit δI und es ist

$$\delta I = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{\partial F}{\partial y_i} - \frac{d}{dx}\frac{\partial F}{\partial y_i'}\right] \delta y_i \, dx.$$

Die Variation δI verschwindet genau dann, wenn die Euler-Lagrange-Gleichungen (89) erfüllt sind.

9.2 Das Hamiltonsche Prinzip

Ein System wird charakterisiert durch die verallgemeinerten Koordinaten $\boldsymbol{q}$ und die zugehörigen Geschwindigkeiten $\dot{\boldsymbol{q}}$. Angenommen, zu den Zeitpunkten t_1 und t_2 nehme das System bestimmte Lagen ein, die durch die Koordinatensätze $\boldsymbol{q}^{(1)}$ und $\boldsymbol{q}^{(2)}$ beschrieben werden.
Das Hamiltonsche Prinzip besagt, dass die Bewegung des Systems zwischen diesen beiden Lagen auf eine solche Weise verläuft, dass das Integral

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L\left(\boldsymbol{q}(t), \dot{\boldsymbol{q}}(t), t\right) \, dt$$

minimal wird, das bedeutet

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L\left(\boldsymbol{q}(t), \dot{\boldsymbol{q}}(t), t\right) \, dt = 0.$$

Die Funktion L ist die bereits bekannte *Lagrange-Funktion*, das Integral S heißt *Wirkung*. Daher wird das Hamiltonsche Prinzip auch das *Prinzip der kleinsten Wirkung* genannt. Aus den Euler-Lagrange-Gleichungen ergeben sich die im Kapitel 2 hergeleiteten Lagrange-Gleichungen 2. Art als notwendige Bedingung dafür, dass S tatsächlich extremal wird.
Das Hamiltonsche Prinzip begründet somit keine neue Mechanik. Seine Bedeutung liegt vielmehr darin, dass es ein allgemein formuliertes Prinzip in der Physik darstellt, mit dem sich die Lagrange-Gleichungen 1. und 2. Art sowie die Hamilton-Gleichungen herleiten lassen. Auch die Äquivalenz zu den Newtonschen Gleichungen lässt sich zeigen. Darüber hinaus lassen sich Anwendungen in weiteren Bereichen der Physik finden, zum Beispiel können die Maxwell-Gleichungen in der Elektrodynamik aus einem Hamilton-Prinzip abgeleitet werden. Die Formulierung

des Hamiltonschen Prinzips ist von den gewählten Koordinaten völlig unabhängig. Für numerische Verfahren ist die Variationsrechnung oftmals günstiger als die Integration der Lagrange-Gleichungen.

10 Die Poisson-Klammern

Eine differenzierbare Funktion $f(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t)$ der Variablen $\boldsymbol{q}(t)$, $\boldsymbol{p}(t)$ und t heißt **Observable** des Systems. Die **Poisson-Klammer** für zwei Observable $f(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t)$ und $g(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t)$ ist definiert als

$$[f, g]_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}} := \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \right).$$

Die Ableitung einer Observablen nach der Zeit

$$\frac{df}{dt} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \frac{\partial f}{\partial t}$$

lässt sich unter Anwendung der kanonischen Gleichungen umformen zu

$$\frac{df}{dt} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial f}{\partial t}.$$

Mithilfe der Poisson-Klammer können wir diesen Ausdruck sehr einfach schreiben:

$$\frac{df}{dt} = [f, H] + \frac{\partial f}{\partial t}.$$

Auch Erhaltungssätze lassen sich mit Poisson-Klammern einfach ausdrücken: Eine nicht explizit von der Zeit abhängige Größe ist genau dann eine Erhaltungsgröße, wenn ihre Poisson-Klammer mit der Hamilton-Funktion verschwindet:

$$f = f(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}) = \text{const.} \quad \Longleftrightarrow \quad [f, H] = 0.$$

Es gilt insbesondere

$$\frac{\partial f}{\partial q_i} = -[p_i, f] \quad \text{und} \quad \frac{\partial f}{\partial p_i} = [q_i, f]$$

sowie für die kanonischen Gleichungen

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = [q_i, H] \quad \text{und} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = [p_i, H].$$

Das heißt, wir erhalten mit den Poisson-Klammern eine völlig symmetrische Darstellung der Hamiltonschen Gleichungen.
Aus der Definition lassen sich eine Reihe von Eigenschaften und Rechenregeln ableiten:

(a) Linearität:

$$[c_1 f + c_2 g, h] = c_1 [f, h] + c_2 [g, h]$$

(b) Antisymmetrie:

$$[f, g] = -[g, f]$$

(c) Existenz eines Nullelementes:

$$[c, f] = 0 \quad \text{mit } c = \text{const.}$$

(d) Produktregel:

$$[fg, h] = f[g, h] + [f, h]g$$

(e) Jacobi-Identität:

$$[f, [g, h]] + [g, [h, f]] + [h, [f, g]] = 0$$

(f) fundamentale Poisson-Klammern:

$$[q_i, q_j] = 0,\ [p_i, p_j] = 0,\ [q_i, p_j] = \delta_{i,j}.$$

Mithilfe der Poisson-Klammern und den oben aufgeführten Rechenregeln lassen sich aus der Hamilton-Funktion eines mechanischen Systems leicht die Bewegungsgleichungen herleiten. Die Poisson-Klammern ermöglichen darüber hinaus die Berechnung weiterer Erhaltungsgrößen. Es gilt das **Poissonsche Theorem**:

> Sind die Observablen f und g Erhaltungsgrößen, dann ist auch die Poisson-Klammer $[f, g]$ eine Erhaltungsgröße.

Somit lässt sich aus zwei bekannten Erhaltungsgrößen eine weitere finden, sofern die Poisson-Klammer eine neue Observable darstellt.
Innerhalb der klassischen Mechanik dienen die Poisson-Klammern zur Feststellung, ob eine Phasenraumtransformation kanonisch ist (nächstes Kapitel). Darüber hinaus entsprechen sie den Kommutatoren in der Quantenmechanik. Diese Analogie eröffnet die Möglichkeit, die Quantenmechanik auf der klassischen Mechanik aufzubauen.

11 Kanonische Transformationen

Die Hamiltonsche Mechanik hat die Betrachtung auf einen $2n$-dimensionalen Phasenraum ausgedehnt. Wir wollen nun die Koordinaten $\boldsymbol{q}$ und $\boldsymbol{p}$ dieses Phasenraumes als prinzipiell gleichberechtigt ansehen und Koordinatentransformationen in allen diesen Koordinaten vornehmen. Wir suchen nach solchen Transformationen, für die es eine Hamiltonfunktion gibt und die kanonischen Gleichungen gelten.

11.1 Punkttransformation

Wir beginnen zunächst mit der schon bekannten Transformation der Lagekoordinaten $q_i \to Q_i(\boldsymbol{q}, t)$, die auch als Punkttransformation bezeichnet wird. Dabei versuchen wir in der Regel, ein Koordinatensystem zu finden, das am vorteilhaftesten ist, das heißt, das die meisten zyklischen Variablen besitzt oder das möglichst einfache Ausdrücke für T und V liefert.
Die neue Lagrange-Funktion ergibt sich, indem wir die alten Koordinaten entsprechend der Transformationsgleichungen durch die neuen Koordinaten ersetzen:

$$L'(\boldsymbol{Q}, \dot{\boldsymbol{Q}}, t) = L(\boldsymbol{q}(\boldsymbol{Q}, t), \dot{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{Q}, \dot{\boldsymbol{Q}}, t), t).$$

Wegen der Invarianz der Lagrange-Gleichungen bezüglich Koordinatentransformation sind die Lagrange-Gleichungen unverändert gültig. Gleichwohl können die daraus resultierenden Bewegungsgleichungen gänzlich verschieden aussehen.
Die kanonischen Impulse und die Hamilton-Funktion können nicht in dieser Weise durch Einsetzen der neuen Variablen transformiert werden.
Die kanonischen Impulse in den neuen Koordinaten ergeben sich definitionsgemäß aus

$$p_i \to P_i = \frac{\partial L'}{\partial \dot{Q}_i} = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial \dot{Q}_i}.$$

Damit ist

$$P_i = \sum_{j=1}^{n} a_{ij}(\boldsymbol{q}, t)\, p_j,$$

wobei a_{ij} die Elemente der Transformationsmatrix

$$a_{ij} = \frac{\partial q_j}{\partial Q_i}$$

bezeichnen.
In ähnlicher Weise leiten wir die Hamilton-Funktion in den neuen Koordinaten mithilfe der Definition ab:

$$H(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t) \to K(\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P}, t) = \sum_{i=1}^{n} P_i \dot{Q}_i(\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P}, t) - L'(\boldsymbol{Q}, \dot{\boldsymbol{Q}}(\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P}, t), t).$$

Die Hamiltonschen Gleichungen sind ebenso wie die Lagrange-Gleichungen forminvariant, so dass gilt

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} \quad \text{und} \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i}.$$

Beispiel: Freies Teilchen im rotierenden Bezugssystem

Ein Teilchen bewege sich ohne Einwirkung eines Potentials in der (x, y)-Ebene. Zur Beschreibung benutzen wir die Polarkoordinaten (r, ϕ). Wir stellen die Lagrange-Funktion auf, berechnen die kanonischen Impulse sowie die Hamilton-Funktion und die kanonischen Gleichungen im ruhenden und anschließend im rotierenden Koordinatensystem.

a) ruhendes Koordinatensystem (r, ϕ)

Die Lagrange-Funktion lautet

$$L = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2)$$

und die kanonischen Impulse ergeben sich somit zu

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}, \quad p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = mr^2\dot{\phi}.$$

Daraus erhalten wir die Hamilton-Funktion

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\phi^2}{2mr^2}.$$

Aus den kanonischen Gleichungen

$$\begin{aligned} \dot{r} &= \frac{\partial H}{\partial p_r} = \frac{p_r}{m} & \qquad \dot{p}_r &= -\frac{\partial H}{\partial r} = \frac{p_\phi^2}{mr^3} \\ \dot{\phi} &= \frac{\partial H}{\partial p_\phi} = \frac{p_\phi}{mr^2} & \qquad \dot{p}_\phi &= -\frac{\partial H}{\partial \phi} = 0 \end{aligned}$$

ergeben sich die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \ddot{r} - r\dot{\phi}^2 &= 0 \\ r\ddot{\phi} + 2\dot{r}\dot{\phi} &= 0. \end{aligned}$$

b) rotierendes Koordinatensystem (R, Φ)

Wir führen nun eine Koordinatentransformation in ein rotierendes Koordinatensystem (R, Φ) mit den Transformationsgleichungen $R = r$ und $\Phi = \phi + \omega t$ aus. Die transformierte Lagrange-Funktion lautet

$$L' = \frac{m}{2}(\dot{R}^2 + R^2(\dot{\Phi} - \omega)^2)$$

und liefert die kanonischen Impulse

$$P_R = \frac{\partial L'}{\partial \dot{R}} = m\dot{R}, \quad P_\Phi = \frac{\partial L'}{\partial \dot{\Phi}} = mR^2(\dot{\Phi} - \omega).$$

Definitionsgemäß berechnen wir die Hamilton-Funktion im neuen Koordinatensystem zu

$$\begin{aligned} K &= \sum_{R,\Phi} P\dot{Q} - L' \\ &= \frac{P_R^2}{2m} + \frac{P_\Phi^2}{2mR^2} + \omega P_\Phi. \end{aligned}$$

Zum Vergleich: Wenn wir die neuen Koordinaten lediglich in die alte Hamilton-Funktion einsetzen, so erhalten wir

$$H(R, P_R, P_\Phi) = \frac{P_R^2}{2m} + \frac{P_\Phi^2}{2mR^2}.$$

Aufstellung der kanonischen Gleichungen

$$\begin{aligned} \dot{R} &= \frac{\partial K}{\partial P_R} = \frac{P_R}{m} & \dot{P}_R &= -\frac{\partial K}{\partial R} = \frac{P_\Phi^2}{mR^3} \\ \dot{\Phi} &= \frac{\partial K}{\partial P_\Phi} = \frac{P_\Phi}{mR^2} + \omega & \dot{P}_\Phi &= -\frac{\partial K}{\partial \Phi} = 0 \end{aligned}$$

führt wiederum zu den Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \ddot{R} - R(\dot{\Phi}^2 - 2\omega\dot{\Phi} + \omega^2) &= 0 \\ R\ddot{\Phi} + 2\dot{R}(\dot{\Phi} - \omega) &= 0. \end{aligned}$$

Vergleichen wir diese mit denen im ruhenden Koordinatensystem, so erkennen wir, dass sie sich durch die Transformationsgleichungen ineinander überführen lassen.

11.2 Kanonische Transformationen

Wir wollen nun erweiterte Transformationen betrachten, bei denen die n Ortskoordinaten und die n Impulse als $2n$ gleichberechtigte Variablen angesehen werden. Eine solche Transformation heißt *Phasenraumtransformation* und wird beschrieben durch die Transformationsgleichungen

$$\begin{aligned} q_i &\to Q_i(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t) \\ p_i &\to P_i(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t). \end{aligned}$$

Die Hamiltonschen Gleichungen sind gegenüber Phasenraumtransformationen nicht notwendig forminvariant. Wir sind hier nur an solchen Transformationen interessiert, für die eine Hamilton-Funktion existiert und die Hamiltonschen Gleichungen

gelten. Es werden folgende Begriffe definiert: Eine Transformation $(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}) \rightarrow (\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P})$ heißt *kanonoid*, wenn nur für bestimmte Hamilton-Funktionen $H(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t)$ jeweils eine Funktion $K(\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P}, t)$ existiert, die die Hamiltonschen Gleichungen im neuen Variablensatz liefert. Die Transformation heißt *kanonisch im weiteren Sinne*, wenn es für alle $H(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t)$ eine solche Funktion $K(\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P}, t)$ im neuen Variablensatz gibt.
Die Abbildung $Q = q$, $P = \sqrt{p} - q^2$ ist ein Beispiel für eine kanonoide Phasenraumtransformation. Für die freie Bewegung (d.h. ohne die Wirkung eines Potentials) existiert im neuen Variablensatz eine Hamilton-Funktion K, während sich für die vertikale Bewegung im homogenen Schwerefeld keine solche Funktion finden lässt.
Die Frage ist nun, ob sich eine allgemeine Bedingung angeben lässt, ob eine Phasenraumtransformation kanonisch ist. Dazu nutzen wir die Äquivalenz von Hamiltonschen Gleichungen und Hamiltonschem Prinzip. Aufgrund dessen muss gelten: Eine Transformation ist kanonisch, wenn für alle Zeiten t_1 und t_2 und alle Hamilton-Funktionen H aus der Gleichung

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_{i=1}^{n} p_i \dot{q}_i - H(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t) \right] dt = 0$$

die Gleichung

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_{i=1}^{n} P_i \dot{Q}_i - K(\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P}, t) \right] dt = 0$$

folgt.
Diese Beziehung wird erfüllt, wenn sich die beiden Integranden nur um einen konstanten Faktor c (mit $c \neq 0$) und das totale Differential einer beliebigen Funktion $F(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P}, t)$ unterscheiden. Das bedeutet, eine Transformation ist genau dann kanonisch (im weiteren Sinne), wenn ein solcher Faktor c und eine Funktion F existieren, so dass

$$\sum_{i=1}^{n} p_i \dot{q}_i - H = c \left[\sum_{i=1}^{n} P_i \dot{Q}_i - K \right] + \frac{d}{dt} F(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{Q}\boldsymbol{P}, t) \tag{90}$$

erfüllt wird. Eine Transformation heißt *eingeschränkt kanonisch* oder *kanonisch im engeren Sinne*, wenn der Faktor $c = 1$ ist. Durch die Ersetzung $Q_i \rightarrow cQ_i$, $P_i \rightarrow P_i$ und $K \rightarrow cK$ kann die Konstante auf 1 transformiert werden, so dass wir die weiteren Betrachtungen auf $c = 1$ beschränken können.

Beispiel für eine kanonische Transformation

Die Transformationgleichungen seien $Q = p$ und $P = q$. Für die ursprünglichen Koordinaten gelten die Hamiltonschen Gleichungen

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad \text{und} \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}.$$

Wir definieren die Hamilton-Funktion für die transformierten Koordinaten als

$$K(Q,P,t) = -H(q(P),p(Q),t).$$

Dann gilt

$$\frac{\partial K}{\partial P} = -\frac{\partial H}{\partial P} = -\frac{\partial H}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial P} = -\frac{\partial H}{\partial q}\cdot 1 = \dot{Q}$$

und analog

$$-\frac{\partial K}{\partial Q} = \frac{\partial H}{\partial Q} = \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial Q} = \frac{\partial H}{\partial p}\cdot 1 = \dot{P}.$$

Das bedeutet, es lässt sich für jede beliebige Hamilton-Funktion H eine transformierte Funktion K angeben, für die die Hamiltonschen Gleichungen erfüllt sind. Die Transformation ist somit kanonisch im weiteren Sinne. Wir suchen nun die Funktion F und den Faktor c, um zu überprüfen, ob die Transformation auch kanonisch im engeren Sinne ist. Dazu formen wir zunächst linke und rechte Seite der Gl. (90) derart um, dass sie nur noch von den Variablen q und p abhängen. Für die linke Seite ergibt sich

$$[p\dot{q} - H] - c[P\dot{Q} - K] = p\dot{q} - cq\dot{p} + (1+c)H$$

und für die rechte Seite

$$\frac{d}{dt}F(q,p,t) = \frac{\partial F}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial F}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial F}{\partial t}.$$

Da q und p voneinander unabhängig sind, können wir einen Koeffizientenvergleich bezüglich $\dot{q}$ und $\dot{p}$ vornehmen und erhalten damit

$$\frac{\partial F}{\partial q} = p \quad \text{und} \quad \frac{\partial F}{\partial p} = -cq.$$

Ableitung beider Beziehungen nach der jeweils anderen Variablen führt auf

$$\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial F}{\partial q} = 1 \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial F}{\partial p} = -c.$$

Wir erhalten somit $c = -1$, die Transformation ist also nicht kanonisch im engeren Sinne. Die Funktion F lautet $F(q,p,t) = qp$. Die Transformation $Q = p$, $P = -q$ ist auch kanonisch im engeren Sinne.

11.3 Die Erzeugende

Im Folgenden betrachten wir die Funktion F näher. F hängt von $4n$ Variablen ab: dem alten und dem neuen Variablensatz. Von diesen sind jedoch nur $2n$ unabhängig voneinander (im obigen Beispiel war $F = F(q,p)$). Damit ergeben sich sechs Darstellungsmöglichkeiten der Funktion:

$$\begin{gathered} F_1(q,Q,t), \quad F_2(q,P,t), \quad F_3(p,Q,t), \\ F_4(p,P,t), \quad F_5(q,p,t), \quad F_6(Q,P,t). \end{gathered}$$

Die Varianten F_5 und F_6 enthalten nur die alten bzw. die neuen Variablen, sie enthalten somit keine Aussagen über die vorgenommene Transformation. Die Formen F_1 bis F_4 heißen *Erzeugende*. Sie beschreiben die zugehörige kanonische Transformation eindeutig. Sie hängen jeweils von n neuen und n alten Variablen ab. Dabei muss es sich um voneinander unabhängige Variablen handeln. Das bedeutet, dass es zu jeder kanonischen Transformation mehrere Erzeugende geben kann, es muss aber nicht alle vier geben. Zum Beispiel existiert für eine Punkttransformation keine Erzeugende $F_1(q,Q,t)$. Existiert eine Erzeugende F_1, so wird die Transformation „vom Typ 1" genannt (entsprechend für die weiteren drei Erzeugenden). Gibt es zu einer Transformation mehrere Erzeugende, so gehört diese Transformation gleichzeitig zu mehreren Typen.

Wir wollen uns nun am Beispiel der Erzeugenden F_1 davon überzeugen, dass wir aus dieser die Transformationsgleichungen ableiten können. Wir bilden zunächst die totale Ableitung von $F_1(q,Q,t)$ nach der Zeit

$$\frac{dF_1}{dt} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial F_1}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i}\dot{Q}_i \right) + \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

und setzen sie in die Bedingung (90) ein, die gelten muss, wenn die Transformation kanonisch ist:

$$\sum_{i=1}^{n} p_i\dot{q}_i - H = \sum_{i=1}^{n} \left(P_i\dot{Q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i}\dot{Q}_i \right) - K + \frac{\partial F_1}{\partial t}.$$

Wegen der Unabhängigkeit der Koordinaten q und Q sind auch deren Ableitung $\dot{q}$ und $\dot{Q}$ voneinander unabhängig. Die Koeffizienten vor den Ableitungen in der Gleichung müssen deshalb auf der linken und rechten Seite gleich sein. Mithilfe eines Koeffizientenvergleichs erhalten wir

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \\ P_i &= -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \\ K &= H + \frac{\partial F_1}{\partial t}. \end{aligned}$$

Aus der Erzeugenden lassen sich somit die Transformationsgleichungen ableiten und umgekehrt. Der Vorteil der Erzeugenden besteht darin, dass es sich nur um eine einzelne Funktion handelt gegenüber $2n$ Transformationsgleichungen. Analoge

Formeln lassen sich auch für die Erzeugenden F_2, F_3 und F_4 finden. Sofern die jeweiligen Erzeugenden existieren, lassen sie sich durch Legendre-Transformationen ineinander überführen.
Die Bedeutung kanonischer Transformationen liegt weniger in der Berechnung der Bewegung mechanischer Systeme. Sie bieten in der Regel keine Vereinfachung dieser Berechnung, da die neuen Variablen oft nicht anschaulich und intuitiv sind und die Berechnung der Transformation letztlich genauso aufwendig ist wie die Lösung in den alten Variablen. Die Bedeutung besteht darin, dass die kanonischen Transformationen die Basis für die statistische Mechanik und die Schrödingersche Wellenmechanik bilden. Sie stellen die Grundlage für die Hamilton-Jacobi-Theorie dar.

12 Kanonische Invarianten

Per Definition bleiben die Hamiltonschen Gleichungen bei einer kanonischen Transformation invariant. Wir wollen nun weitere Invarianten kennenlernen.

12.1 Fundamentale Poisson-Klammern

Bei einer kanonischen Transformation bleiben die fundamentalen Poisson-Klammern invariant, so dass auch in den neuen Koordinaten

$$[Q_i, Q_j]_{q,p} = 0,\ [P_i, P_j]_{q,p} = 0,\ [Q_i, P_j]_{q,p} = \delta_{ij}$$

gilt. Mehr noch: Eine Transformation ist genau dann kanonisch (im engeren Sinne), wenn die fundamentalen Poisson-Klammern invariant sind. Damit ergibt sich eine einfache Möglichkeit, um eine Transformation daraufhin zu überprüfen, ob sie kanonisch ist. Im Beispiel aus dem vorigen Kapitel $Q_i = p_i$ und $P_i = q_i$ ergibt sich leicht

$$\begin{aligned} [Q_i, P_j]_{q,p} &= \sum_{K=1}^{n} \left(\frac{\partial Q_i}{\partial q_k} \frac{\partial P_j}{\partial p_k} - \frac{\partial Q_i}{\partial p_k} \frac{\partial P_j}{\partial qk} \right) \\ &= \sum_{k=1}^{n} -\delta_{ik}\delta_{jk} = -\delta_{ij}. \end{aligned}$$

Das heißt, die Transformation ist nicht kanonisch im engeren Sinne. Demgegenüber ergibt sich für die Transformation $Q_i = p_i$ und $P_i = -q_i$

$$\begin{aligned} [Q_i, P_j]_{q,p} &= \sum_{K=1}^{n} \left(\frac{\partial Q_i}{\partial q_k} \frac{\partial P_j}{\partial p_k} - \frac{\partial Q_i}{\partial p_k} \frac{\partial P_j}{\partial qk} \right) \\ &= \sum_{k=1}^{n} -\delta_{ik}(-\delta_{jk}) = \delta_{ij}. \end{aligned}$$

Diese Transformation ist daher kanonisch im engeren Sinne.

12.2 Phasenvolumen

Bei einer kanonischen Transformation verändern sich zwar die Grenzen, nicht aber das eingeschlossene Volumen, so dass gilt:

$$\int \ldots \int dq_1 \ldots dq_n dp_1 \ldots dp_n = \int \ldots \int dQ_1 \ldots dQ_n dP_1 \ldots dP_n.$$

Zum Beweis dieser Beziehung benötigen wir die Definition der Funktionaldeterminante

$$\frac{\partial(y_1, \ldots, y_n)}{\partial(x_1, \ldots, x_n)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \ldots & \frac{\partial y_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial y_n}{\partial x_1} & \ldots & \frac{\partial y_n}{\partial x_n} \end{vmatrix}$$

und führen die Abkürzung

$$D = \frac{\partial(Q_1, \ldots, Q_n, P_1, \ldots, P_n)}{\partial(q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n)}$$

ein.

Für das Phasenvolumen in den neuen Koordinaten gilt allgemein

$$\int \ldots \int dQ_1 \ldots dQ_n dP_1 \ldots dP_n = \int \ldots \int D dq_1 \ldots dq_n dp_1 \ldots dp_n.$$

Es genügt also zu zeigen, dass $D = 1$.

Funktionaldeterminanten können wie ein Bruch behandelt werden. Vertauschung zweier Variablen oder zweier Funktionen ergibt einen Faktor -1. Wir „erweitern“ D, indem wir „Zähler“ und „Nenner“ durch $\partial(q_1, \ldots, q_n, Q_1, \ldots, Q_n)$ teilen, und erhalten

$$D = \frac{\partial(Q_1, \ldots, Q_n, P_1, \ldots, P_n)}{\partial(q_1, \ldots, q_n, Q_1, \ldots, Q_n)} \Big/ \frac{\partial(q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n)}{\partial(q_1, \ldots, q_n, Q_1, \ldots, Q_n)}.$$

Nun vertauschen wir in der linken Determinante die ersten n Zeilen mit den letzten n Zeilen

$$D = (-1)^n \frac{\partial(P_1, \ldots, P_n, Q_1, \ldots, Q_n)}{\partial(q_1, \ldots, q_n, Q_1, \ldots, Q_n)} \Big/ \frac{\partial(q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n)}{\partial(q_1, \ldots, q_n, Q_1, \ldots, Q_n)}.$$

Stehen in einer Funktionaldeterminante gleiche Größen in „Zähler“ und „Nenner“ übereinander, so reduziert sich die Determinante auf die übrigen Variablen, wobei die gestrichenen Variablen konstant gehalten werden. Das bedeutet

$$D = (-1)^n \left. \frac{\partial(P_1, \ldots, P_n}{\partial(q_1, \ldots, q_n)} \right|_{Q=\text{konst}} \Big/ \left. \frac{\partial(p_1, \ldots, p_n)}{\partial(Q_1, \ldots, Q_n)} \right|_{q=\text{konst}}.$$

Wir betrachten nun jeweils das i-te Element in der j-ten Zeile und benutzen die Bestimmungsgleichung aus der Erzeugenden F_1. Für die linke Determinante ergibt sich

$$\frac{\partial p_j}{\partial q_i} = \frac{\partial}{\partial q_i}\left(-\frac{\partial F_1}{\partial Q_j}\right) = -\frac{\partial^2 F_1}{\partial q_i \partial Q_j}$$

und für die rechte

$$\frac{\partial p_j}{\partial Q_i} = \frac{\partial}{\partial Q_i}\left(\frac{\partial F_1}{\partial q_j}\right) = \frac{\partial^2 F_1}{\partial Q_i \partial q_j}.$$

Das bedeutet, die beiden Determinanten unterscheiden sich nur darin, dass die Zeilen und Spalten vertauscht sind, was für die Berechnung der Determinante keine Rolle spielt, und um den Vorfaktor $(-1)^n$. Wir erhalten also

$$D = (-1)^n \cdot (-1)^n = 1$$

und haben damit die Invarianz des Phasenvolumens bewiesen.

Die Invarianz des Phasenvolumens ist eine wichtige Eigenschaft beim Übergang zur statistischen Mechanik, insbesondere beim Übergang von der Verteilungsfunktion von Mikrozuständen zum thermodynamischen Makrozustand.