Kapitel 3

Mathematische Weiterentwicklung

Vereinbarungen:

(i) Im folgenden seien nur noch (holonome) Systeme betrachtet, die die Voraussetzungen der Abschnitte 1.2.1.3 und 1.2.2.4 erfüllen. Es existieren also (jeweils lokal) **unabhängige** generalisierte Koordinaten $q^1, \ldots, q^n$ (n = Zahl der Freiheitsgrade) und die verallgemeinerten eingeprägten Kräfte Q^e_ν ergeben sich[1] entsprechend (1.54) aus einem verallgemeinerten Potential U.

(ii) Im folgenden wird i.d. Regel folgende Kurzschrift verwendet:

$$\begin{array}{rcl} x & \stackrel{\text{def}}{=} & (\vec{x}_1, \ldots, \vec{x}_N) \quad , \quad \dot{x} \stackrel{\text{def}}{=} \left(\dot{\vec{x}}_1, \ldots, \dot{\vec{x}}_N\right) , \\ q & \stackrel{\text{def}}{=} & (q^1, \ldots, q^n) \quad , \quad \dot{q} \stackrel{\text{def}}{=} (\dot{q}^1, \ldots, \dot{q}^n) . \end{array}$$

3.1 Hamilton-Theorie

3.1.1 Das Hamilton-Prinzip

3.1.1.1 Das Prinzip

Je zwei Zeitpunkten t_1, t_2 sei durch

$$W_{t_1,t_2}(x(.)) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{t_1}^{t_2} L\left(x(t), \dot{x}(t), t\right) \mathrm{d}t \tag{3.1}$$

eine Abbildung von der Menge der **Funktionen** $x(.)$ (durch die Zeit t parametrisierte Bahnkurven im $\mathbb{R}^{3N}$) in den $\mathbb{R}^1$ zugeordnet. Dieses Funktional bezeichnet man als das ***Wirkungsintegral*** (über dem Zeitintervall $[t_1, t_2]$).

WS 1995/96

[1] Dabei muß nicht unbedingt auch (1.57) gelten.

Dann lautet das sog. HAMILTON-***Prinzip***:

Ein mit den Nebenbedingungen verträglicher (und hinreichend gutartiger) Bewegungsablauf $x(.)$ entspricht genau dann der durch L gegebenen Dynamik, wenn

$$\boxed{x(t_j,s)=x(t_j)\quad \forall\, s\in\mathbb{R}\,;\; j=1,2 \implies \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}W_{t_1,t_2}\left(x(.,s)\right)\right)_{|s=0}=0} \tag{3.2}$$

für alle virtuellen Verrückungen $\{x(.,s)\}_{s\in\mathbb{R}}$ und $t_1,t_2\in\mathbb{R}$ gilt.

Anmerkungen:

(i) Im Falle (3.2) sagt man, das Wirkungsintegral sei für $x(.)$ ***stationär***, weil sich bei virtueller Verrückung (= ***Variation***) von $x(.)$ (unter Beibehaltung der Bahnpunkte bei t_1 und t_2!) in erster Näherung (für kleine s) der Funktionalwert nicht ändert.

(ii) Im allgemeinen gibt es mehrere $x(.)$, die (3.2) erfüllen, zu vorgegebenen $x(t_1), x(t_2)$.

(iii) Sei $f(q,\dot q,t)$ hinreichend gutartig. Dann hat die Addition der ***totalen zeitlichen Ableitung*** $\dot f(q,\dot q,t)$ zur LAGRANGE-Funktion offenbar keine Bedeutung für das Variationsprinzip — im Einklang mit Anmerkung (i) von 1.2.2.3.

Beispiel: Für ein 1-Teilchen-System mit zeitunabhängigem Konfigurationsraum[2] $\mathcal{M}$, auf das keine eingeprägten Kräfte wirken, gilt

$$L=T=\frac{m}{2}|\dot{\vec x}|^2\,.$$

Für tatsächlich mögliche Bewegungen $x(.)$ muß nach dem HAMILTON-Prinzip also

$$0=\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\int_{t_1}^{t_2}\left|\frac{\partial}{\partial t}\vec x(t,s)\right|^2\,\mathrm{d}t\right)_{|s=0} \tag{3.3}$$

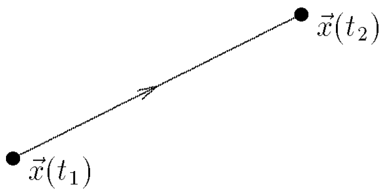
für alle $t_1,t_2\in\mathbb{R}$ und alle virtuellen Verrückungen mit $\vec x(t_j,s)=\vec x(t_j)$ gelten.

WS 1995/96

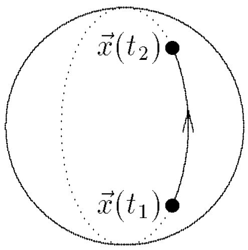
[2] Vgl. 1.2.1.3. Es soll also $\frac{\partial}{\partial t}q=0=\frac{\partial}{\partial t}x$ gelten.

Daraus folgt (Übungsaufgabe), daß $|\dot{\vec{x}}|$ konstant sein muß (Energiesatz!) und[3] daß die Bahnkurve eine ***Geodäte*** auf $\mathcal{M}$ ist, d.h. daß die kürzeste Verbindung zwischen je zwei Punkten, die durch ein hinreichend kurzes Bahnstück verbunden sind, stets ganz auf der Bahnkurve liegt.

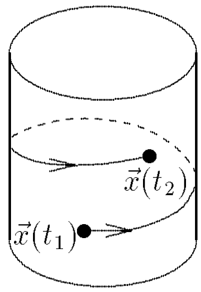
$\mathcal{M} = \mathbb{R}^3$:



$\mathcal{M}$ = Kugeloberfläche:[4]



$\mathcal{M}$ = Zylinderoberfläche:



WS 1995/96

[3]Wenn $|\dot{\vec{x}}| = v$ konstant ist, gilt nämlich

$$\begin{aligned} v\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\int_{t_1}^{t_2}\left|\frac{\partial}{\partial t}\vec{x}(t,s)\right|\,\mathrm{d}t\right)_{|s=0} &= v\left(\int_{t_1}^{t_2}\frac{\dot{\vec{x}}(t)\cdot\frac{\partial}{\partial s}\frac{\partial}{\partial t}x(t,s)}{\left|\frac{\partial}{\partial t}\vec{x}(t,s)\right|}\,\mathrm{d}t\right)_{|s=0} \\ &= \left(\int_{t_1}^{t_2}\dot{\vec{x}}(t)\cdot\frac{\partial}{\partial s}\frac{\partial}{\partial t}x(t,s)\,\mathrm{d}t\right)_{|s=0} \\ &= \frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\int_{t_1}^{t_2}\left|\frac{\partial}{\partial t}\vec{x}(t,s)\right|^2\,\mathrm{d}t\right)_{|s=0}. \end{aligned}$$

[4]Die Bewegung von $\vec{x}(t_1)$ nach $\vec{x}(t_2)$ mit konstanter Geschwindigkeit auf dem **hinteren** Großkreisstück stellt einen ***Sattelpunkt*** des Wirkungsintegrals $W = \int_{t_1}^{t_2}\left|\frac{\partial}{\partial t}\vec{x}(t)\right|^2 dt$ dar, d.h. es gilt zwar (3.3), aber es gibt Bewegungen von $\vec{x}(t_1)$ nach $\vec{x}(t_2)$, für die W größer ist **und** auch solche, für die W kleiner ist als für die Bewegung auf dem vorderen (kürzeren) Großkreisstück.

3.1.1.2 Äquivalenz zum D'ALEMBERTschen Prinzip

Es genügt,[5] das HAMILTON-Prinzip **lokal** auszuwerten, d.h. zu geg. $x(.)$ und t_1 nur solche t_2 betrachten, die hinreichend nahe bei t_1 liegen.

Das so eingeschränkte HAMILTON-Prinzip läßt sich also in generalisierten Koordinaten formulieren:

Mit

$$\begin{aligned} L(q,\dot{q},t) &\stackrel{\text{def}}{=} L\left(x(q,t),\dot{x}(q,\dot{q},t),t\right)\,, \\ W_{t_1,t_2}\left(q(.)\right) &\stackrel{\text{def}}{=} \textstyle\int_{t_1}^{t_2} L\left(q(t),\dot{q}(t),t\right)\,\mathrm{d}t = W_{t_1,t_2}\left(x(.)\right) \end{aligned}$$

und der formalen Schreibweise[6]

$$\begin{aligned} \delta W_{t_1,t_2}\left(q(.)\right) &\stackrel{\text{def}}{=} W_{t_1,t_2}\left(q(.,\mathrm{d}s)\right) - W_{t_1,t_2}\left(q(.,0)\right) \\ &= \left(\tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} W_{t_1,t_2}\left(q(.,s)\right)_{|s=0}\right)\mathrm{d}s\,, \\ \delta L(t) &\stackrel{\text{def}}{=} \left(\tfrac{\partial}{\partial s} L\left(q(t,s),\tfrac{\partial}{\partial t}q(t,s),t\right)_{|s=0}\right)\mathrm{d}s\,, \\ \delta\dot{q}(t) &\stackrel{\text{def}}{=} \left(\tfrac{\partial}{\partial s}\tfrac{\partial}{\partial t}q(t,s)\right)_{|s=0}\mathrm{d}s \end{aligned}$$

usw.

$(q(t,s) = q\left(x(t,s),t\right))$ wird (3.2) äquivalent zu

$$\boxed{\begin{array}{c} \delta W_{t_1,t_2}\left(q(.)\right) = 0 \quad \text{für alle virtuellen Verrückungen mit:} \\ q(t_j,s) = q(t_j) \quad \text{für } j = 1,2 \text{ und bel. } s\,. \end{array}} \tag{3.4}$$

Dabei gilt nach den Regeln der Differentiation impliziter Funktionen[7]

$$\delta W_{t_1,t_2} = \int_{t_1}^{t_2} \delta L\,\mathrm{d}t = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{\nu=1}^{n} \left(\left(\frac{\partial}{\partial q^\nu} L\right) \delta q^\nu - \left(\frac{\partial}{\partial \dot{q}^\nu} L\right) \underbrace{\delta\dot{q}^\nu}_{=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\delta q^\nu} \right) \mathrm{d}t\,,$$

sowie nach den Regeln für partielle Integration:

$$\int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{q}^\nu} L\right) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\delta q^\nu\,\mathrm{d}t = \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial \dot{q}^\nu} L\right) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} q^\nu \Big|_{t=t_1}^{t=t_2}}_{=0 \text{ n.Vorauss. an q(t,s)}} - \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial \dot{q}^\nu} L\right) \delta q^\nu\,\mathrm{d}t\,.$$

Daraus ergibt sich:

$$\boxed{\delta W_{t_1,t_2} = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{\nu=1}^{n} \left(\frac{\partial}{\partial q^\nu} L - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial \dot{q}^\nu} L\right) \delta q^\nu\,\mathrm{d}t\,.} \tag{3.5}$$

WS 1995/96

[5] Siehe Beweisskizze zu Folgerung 3.1.1.

[6] Vgl. (1.7) und Fußnote 23 von Kapitel 1.

[7] Vgl. Erinnerung zu (1.3).

Genaue Bedeutung von (3.5):

$$\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}W_{t_1,t_2}\left(q(.,s)\right)_{|s=0}\\&=\int_{t_1}^{t_2}\sum_{\nu=1}^{n}\left(\frac{\partial}{\partial q^\nu}L(q,\dot q,t)_{|q=q(t),\dot q=\dot q(t)}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Big(\frac{\partial}{\partial \dot q^\nu}L(q,\dot q,t)_{|q=q(t),\dot q=\dot q(t)}\Big)\right)\frac{\partial}{\partial s}q(t,s)_{|s=0}\,\mathrm{d}t\,.\end{aligned} \tag{3.6}$$

Da die $\frac{\partial}{\partial s}q^\nu(t,s)_{|s=0}$ bis auf die Einschränkung

$$0=\frac{\partial}{\partial s}q^\nu(t_j,s)_{|s=0}$$

völlig beliebig sind,[8] ist also (3.4) äquivalent zur (lokalen) Gültigkeit der LAGRANGE-Gleichungen II. Art

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial \dot q^\nu}L-\frac{\partial}{\partial q^\nu}L=0\,. \tag{3.7}$$

Es gilt nämlich der

Fundamentalsatz der Variationsrechnung: *Sei $f(t)$ eine stetige Funktion über dem offenen Intervall $(t_1,t_2)\subset\mathbb{R}^1$. Falls $\int_{t_1}^{t_2}f(t)g(t)\,\mathrm{d}t=0$ für alle beliebig oft differenzierbaren Funktionen $g(t)\geq 0$ gilt, die außerhalb eines kompakten Teilintervalls von (t_1,t_2) verschwinden, dann ist $f(t)=0\;\forall\, t\in(t_1,t_2)$.*

Beweisskizze: Angenommen, es sei $f(t_0)\neq 0$, $t_0\in(t_1,t_2)$. O.B.d.A.: $f(t_0)>0$. Aufgrund der vorausgesetzten Stetigkeit ist dann $f(t)$ innerhalb einer hinreichend kleinen, abgeschlossenen ϵ-Umgebung $\overline{U_\epsilon(t_0)}\subset(t_1,t_2)$ von t_0 strikt positiv. Mit der Definition

$$g(t)\stackrel{\text{def}}{=}\begin{cases}e^{-\frac{\epsilon^2}{\epsilon^2-(t-t_0)^2}} & \text{für } t\in U_\epsilon(t_0)\\ 0 & \text{sonst}\end{cases}$$

folgt somit

$$\int_{t_1}^{t_2}f(t)g(t)\,\mathrm{d}t>o$$

und daraus ein Widerspruch zu den Voraussetzungen. ∎

Folgerung 3.1.1 *Das in Abschnitt 3.1.1.1 formulierte* HAMILTON*sche Prinzip ist äquivalent zur Gültigkeit der* LAGRANGE-*Gleichungen II. Art (3.7) in jedem System generalisierter Koordinaten der (zu Beginn dieses Kapitels) vereinbarten Art.*

Beweisskizze: Für hinreichend nahe Zeitpunkte t_1,t_2 haben wir die Behauptung gerade bewiesen. Um den Fall großer Zeitintervalle $[t_1,t_2]$ auf den hinreichend kleiner Zeitintervalle $J_j=[t_{j,1},t_{j,2}]$, $j=1,\ldots,l$, zurückzuführen, wählen wir letztere so, daß

$$[t_1,t_2]\subset\bigcup_{j=1}^{l}J_j$$

[8]Man setze (für hinreichend kleine s) z.B. $q^\nu(t,s)=q^\nu(t)+sf_\nu(t)$ zu vorgegebenen $\frac{\partial}{\partial s}q^\nu(t_j,s)_{|s=0}=f_\nu(t)$.

gilt, und zu jedem J_j eine glatte Funktion $h_j(t)$ mit

$$h_j(t) = 0 \quad \text{falls } t \neq J_j$$

so, daß

$$\sum_{j=1}^{l} h_j(t) = 1 \quad \forall\, t \in [t_1, t_2]$$

und mit

$$x_j(t,s) \stackrel{\text{def}}{=} h_j(t)\,(x(t,s) - x(t))$$

daher

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} W_{t_1,t_2}(x(.,s))\right)_{|s=0} &= \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} W_{t_1,t_2}\left(x(.) + \sum_{j=1}^{l} x_j(.,s)\right)\right)_{|s=0} \\
&= \sum_{j=1}^{l} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} W_{t_1,t_2}\Big(x(.) + x_j(.,s)\Big)\right)_{|s=0} \\
&= \sum_{j=1}^{l} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} W_{t_{j,1},t_{j,2}}\Big(x(.) + x_j(.,s)\Big)\right)_{|s=0}
\end{aligned}$$

gilt. ▮

Da die Gültigkeit der LAGRANGE-Gleichungen II. Art für den tatsächlichen Bewegungsablauf äquivalent zum D'ALEMBERTschen Prinzip ist,[9] folgt somit:

> Das eingeschränkte HAMILTON-Prinzip ist äquivalent zum D'ALEMBERTschen Prinzip (1.12).

Die LAGRANGE-Gleichungen (3.7) bezeichnet man auch als EULER-LAGRANGE-***Gleichungen*** des Variationsprinzips (3.5).

3.1.1.3 Plausibilität des HAMILTONschen Prinzips für konservative, skleronome Systeme

Für **uneingeschränkte** Systeme stimmen die EULER-LAGRANGE-Gleichungen des **Hamilton**-Prinzips (3.2) offensichtlich mit den NEWTONschen Gleichungen (1.9) mit $\vec{K}_\nu^{\mathrm{Z}} = 0$ überein.[10]

Es mag zunächst verblüffen, daß man die Dynamik der entsprechend **eingeschränkten** Systeme (zu denen zusätzlich zu den bisherigen eingeprägten Kräften

WS 1995/96

[9] Vgl. 1.2.2.2 und 1.2.2.3.

[10] Denn: $0 = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\frac{\partial}{\partial \dot{x}_\nu^j} - \frac{\partial}{\partial x_\nu^j}\right) \underbrace{\left(\sum_{\nu=1}^{N} \frac{m_\nu}{2}\|\dot{\vec{x}}_\nu\|^2 - U\right)}_{\underset{(1.55)}{=} L} = m_\nu \ddot{x}_\nu^j - \underbrace{\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\frac{\partial}{\partial \dot{x}_\nu^j} - \frac{\partial}{\partial x_\nu^j}\right) U}_{\underset{(1.57)}{=} \vec{K}_\nu^e \cdot \vec{e}_j}$.

noch die Zwangskräfte hinzutreten) dadurch voll erfaßt, daß man beim HAMILTON-Prinzip lediglich die Variation auf Bewegungsabläufe beschränkt, die mit den Nebenbedingungen verträglich sind.[11]

Für **konservative, skleronome** Systeme wird das plausibel, wenn man sich das eingeschränkte System mit dem (zeitunabhängigen) Konfigurationsraum K folgendermaßen durch uneingeschränkte Systeme mit zusätzlichen eingeprägten Kräften vorstellt, die vom Zusatzpotential $U^{\mathrm{Z}}(x)$ herrühren:[12]

U^{Z} ist (entspr. dem D'ALEMBERTschen Prinzip) auf K konstant und wächst außerhalb K 'gleichmäßig' rasch an. Aufgrund des Energiesatzes (Abschnitt 1.2.2.4) kann sich dann eine dynamisch erlaubte Bahnkurve nur wenig von K entfernen. Die Einhaltung der idealisierten Nebenbedingungen entspricht dem Grenzfall **unendlich** raschen Anwachsens von U^{Z} außerhalb K.

Die dynamisch erlaubten Bewegungsabläufe, die ja den Extremwerten der W_{t_1,t_2} hinsichtlich sämtlicher denkbarer Bewegungsabläufe entsprechen, gehen dann in die Extremwerte hinsichtlich der mit den idealisierten Nebenbedingungen verträglichen Bewegungsabläufe über. Für letztere ist aber U^{Z} ohne Belang.

Somit ergibt sich das HAMILTONsche Prinzip für eingeschränkte Systeme.

3.1.2 Die kanonischen Gleichungen

3.1.2.1 Legendre-Transformation

Eine (hinreichend gutartige) Funktion $f(\vec{v})$ über $\mathbb{R}^n$ heißt ***konvex***, wenn die zweite Richtungsableitung für jede Richtung über dem gesamten Indem $\mathbb{R}^n$ positiv ist; d.h. wenn[13]

$$0 \neq \vec{e} \in \mathbb{R}^n \Longrightarrow \left(\vec{e} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{v}}\right)^2 f(\vec{v}) > 0 \;\forall\, \vec{v} \in \mathbb{R}^n\,.$$

Man macht sich leicht klar, daß

$$\begin{array}{l} \text{für } \textbf{konvexes } f(\vec{x}) : \\ \operatorname{grad} f(\vec{v}_1) = \operatorname{grad} f(\vec{v}_2) \Longleftrightarrow \vec{v}_1 = \vec{v}_2\,. \end{array} \tag{3.8}$$

Abstrakter **Beweis** für $\Longrightarrow$: Aus der Implikations-Voraussetzung folgt

$$\begin{aligned} 0 &= (\vec{v}_1 - \vec{v}_2) \cdot (\operatorname{grad} f(\vec{v}_1) - \operatorname{grad} f(\vec{v}_2)) \\ &= (\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \cdot \int_0^1 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \operatorname{grad} f\left(\vec{v}_1 - (\vec{v}_1 - \vec{v}_2)t\right)\, \mathrm{d}t \\ &= \int_0^1 \underbrace{\left((\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{v}}\right)^2 f(\vec{v})|_{\vec{v} = \vec{v}_1 - (\vec{v}_1 - \vec{v}_2)t}}_{>0 \text{ für } \vec{v}_1 \neq \vec{v}_2} \, \mathrm{d}t \end{aligned}$$

und daraus $\vec{v}_1 = \vec{v}_2$. ∎

WS 1995/96

[11] Die LAGRANGE-Funktion wird dagegen nicht geändert.

[12] Vgl. [Arn88, Abschnn. 4.1.1].

[13] Äquivalente Definition für $n = 1$: $\underbrace{\frac{f(v_1) + f(v_2)}{2}}_{f_{\text{mitt}}} > f\Big(\underbrace{\frac{v_1 + v_2}{2}}_{v_{\text{mitt}}}\Big)\,.$

Falls also grad f für fest vorgegebenes konvexes f überhaupt einen betrachteten Wert $\vec{p}$ annimmt, dann an einer eindeutig durch $\vec{p}$ bestimmten Stelle. Mit anderen Worten:

> Zu jedem konvexen $f(\vec{v})$ existiert somit eine eindeutige Abbildung $\vec{v}(\vec{p})$ von
> $$G \stackrel{\text{def}}{=} \{\operatorname{grad} f(\vec{v}) \; : \; \vec{v} \in \mathbb{R}^n\}$$
> **auf** den $\mathbb{R}^n$ mit
> $$\vec{p} = \operatorname{grad} f\left(\vec{v}(\vec{p})\right) \quad \forall\, \vec{p} \in G\,. \tag{3.9}$$

Umgekehrt ergibt sich $\vec{v}(\vec{p})$ (im Falle hinreichender Gutartigkeit) gemäß

$$\vec{v}(\vec{p}) = \operatorname{grad} l(\vec{p}) \tag{3.10}$$

aus der sog. LEGENDRE-***Transformation***[14]

$$l(\vec{p}) \stackrel{\text{def}}{=} \vec{p} \cdot v(\vec{p}) - f\left(\vec{v}(\vec{p})\right) \quad \text{für } \vec{p} \in G \tag{3.11}$$

von f ; denn:

$$\frac{\partial}{\partial p^j} l(\vec{p}) = v^j(\vec{p}) + \vec{p} \cdot \frac{\partial}{\partial p^j} \vec{v}(\vec{p}) - \left(\frac{\partial}{\partial p^j} \vec{v}(\vec{p})\right) \cdot \underbrace{\operatorname{grad} f\left(\vec{v}(\vec{p})\right)}_{\underset{(3.9)}{=} \vec{p}} .$$

Verallgemeinerung dieser Überlegungen führt auf folgenden

Satz 3.1.2 *Sei O eine offene Teilmenge des $\mathbb{R}^{n'}$ und sei $f(\vec{x}, \vec{v})$ eine (hinreichend gutartige) Funktion über $\mathcal{O} \times \mathbb{R}^n$, die für beliebiges festes $\vec{x} \in \mathcal{O}$ eine* **konvexe** *Funktion von $\vec{v}$ ist. Dabei sei*

$$\left\{\vec{\nabla}_{\vec{v}} f(\vec{x}, \vec{v}) \; : \; \vec{v} \in \mathbb{R}^n\right\} = \mathbb{R}^n \quad \forall\, \vec{x} \in \mathcal{O}\,.$$

Dann existiert eine eindeutige (und hinreichend gutartige) Abbildung $\vec{v}(\vec{x}, \vec{p})$ von $\mathcal{O} \times \mathbb{R}^n$ auf den $\mathbb{R}^n$ mit

$$\vec{p} = \vec{\nabla}_{\vec{v}} f(\vec{x}, \vec{v})_{|\vec{v} = \vec{v}(\vec{x}, \vec{p})}\,, \quad \vec{v}(\vec{x}, \vec{p}) = \vec{\nabla}_{\vec{p}} l(\vec{x}, \vec{p})$$

und

$$\vec{\nabla}_{\vec{x}} l(\vec{x}, \vec{p}) = -\vec{\nabla}_{\vec{x}} f(\vec{x}, \vec{v})_{|\vec{v} = \vec{v}(\vec{x}, \vec{p})}\,,$$

wobei:

$$l(\vec{x}, \vec{p}) \stackrel{\text{def}}{=} \vec{p} \cdot \vec{v}(\vec{x}, \vec{p}) - f\left(\vec{x}, \vec{v}(\vec{x}, \vec{p})\right) \text{ für } (\vec{x}, \vec{p}) \in \mathcal{O} \times \mathbb{R}^n$$

*(LEGENDRE-**Transformation** von f hinsichtlich $\vec{v}$).*

WS 1995/96

[14] Man kann zeigen, daß die LEGENDRE-Transformierte von f durch

$$l(\vec{p}) = \max_{\vec{v} \in \mathbb{R}^n} \left(\vec{p} \cdot \vec{v} - f(\vec{v})\right)$$

gegeben ist.

Beweis: Anwendung der bisherigen Überlegungen für jeweils festes $\vec{x}$ liefert alle Aussagen außer

$$\vec{\nabla}_{\vec{x}} l(\vec{x},\vec{p}) = -\vec{\nabla}_{\vec{x}} f(\vec{x},\vec{v})_{|\vec{v}=\vec{v}(\vec{x},\vec{p})} \, .$$

Letzteres folgt gemäß

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x^j} l(\vec{x},\vec{p}) &= \frac{\partial}{\partial x^j}\left(\vec{p}\cdot\vec{v}(\vec{x},\vec{p}) - f\left(\vec{x},\vec{v}(\vec{x},\vec{p})\right)\right) \\
&= \vec{p}\cdot\frac{\partial}{\partial x^j}\vec{v}(\vec{x},\vec{p}) - \frac{\partial}{\partial x^j} f(\vec{x},\vec{p})_{|\vec{v}=\vec{v}(\vec{x},\vec{p})} - \left(\frac{\partial}{\partial x^j}\vec{v}(\vec{x},\vec{p})\right)\cdot\underbrace{\vec{\nabla}_{\vec{v}} f(\vec{x},\vec{p})_{|\vec{v}=\vec{v}(\vec{x},\vec{p})}}_{=\vec{p}} \\
&= -\frac{\partial}{\partial x^j} f(\vec{x},\vec{p})_{|\vec{v}=\vec{v}(\vec{x},\vec{p})} \, . \qquad \blacksquare
\end{aligned}$$

3.1.2.2 Bewegungsgleichungen 1. Ordnung für generalisierte Koordinaten und Impulse

Um die eindeutige (lokale) Lösbarkeit der LAGRANGE-Gleichungen (3.7) direkt zu erkennen, möchte man gern die Gleichungen in die Form

$$\dot{\xi}_\mu(t) = f_\mu\left(\xi_1(t),\ldots,\xi_{2n}(t),t\right)\ ;\ \mu = 1,\ldots,2n$$

bringen, wobei die $\xi_1(t),\ldots,\xi_{2n}(t)$ zu jedem Zeitpunkt den $q^1(t),\ldots,\dot{q}^n(t)$ eindeutig zugeordnet sind.[15]

Im Prinzip könnte man für die ξ_μ die $q^1(t),\ldots,\dot{q}^n(t)$ selbst wählen.[16] Eine andere Möglichkeit, die sich direkt anbietet und im Hinblick auf die Erhaltungssätze (1.61) besonders zweckmäßig erscheint, ist die Verwendung der q^ν und ihrer kanonisch konjugierten Impulse p_μ:

Die erste Hälfte des Gleichungssystems besteht dann in der Angabe der $\dot{q}^\nu(t)$ als Funktionen der $q^\mu(t), p_\rho(t)$ sowie der Zeit t (Auflösung der Definitionsgleichung (1.60) für die p_ρ nach den $\dot{q}^\nu$):

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} q^\nu(t) = \dot{q}^\nu\left(q(t),p(t),t\right) \text{ für } \nu = 1,\ldots,n \tag{3.12}$$

(wobei $p(t) \stackrel{\text{def}}{=} (p_1(t),\ldots,p_n(t))$).

Die zweite Hälfte folgt dann direkt aus (1.59):

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} p_\nu(t) = \frac{\partial}{\partial q^\nu} L(q,\dot{q},t)_{|q=q(t),\dot{q}=\dot{q}(q(t),p(t),t)} \, . \tag{3.13}$$

Identifiziert man entsprechend

$$p_\nu \underset{(1.60)}{=} \frac{\partial}{\partial \dot{q}^\nu} L$$

WS 1995/96

[15]Man fasse $\vec{f}$ im Sinne von Kapitel 5 d. Einf. i.d. Theor. Phys. als zeitabhängiges **Geschwindigkeitsfeld** über dem $\vec{\xi}$-Raum auf!

[16]Vgl. Anmerkung (ii) von 1.2.2.2.

in Satz 3.1.2 von 3.1.2.1 $\vec{v}$ mit $\dot{q}$, $\vec{p}$ mit p, $\vec{x}$ mit (q,t), f mit L, und führt man die sog. HAMILTON-***Funktion***:

$$H(q,p,t) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\nu=1}^{n} p_\nu \dot{q}^\nu(q,p,t) - L\left(q, \dot{q}(q,p,t), t\right) \tag{3.14}$$

(LEGENDRE-Transformation von L hins. $\dot{q}$; in Satz 3.1.2 mit l statt H bezeichnet) ein, so gehen die Gleichungen (3.12), (3.13) über in die sog. HAMILTON***schen kanonischen Gleichungen***:

$$\begin{aligned} \dot{q}^\nu(t) &= +\frac{\partial}{\partial p_\nu} H\left(q(t), p, t\right)_{|_{p=p(t)}}, & (3.15)\\ \dot{p}_\nu(t) &= -\frac{\partial}{\partial q^\nu} H\left(q, p(t), t\right)_{|_{q=q(t)}}, & (3.16)\end{aligned}$$

die also lokal äquivalent zu den LAGRANGE-Gleichungen II. Art sind. Zusätzlich ergibt sich:

$$\frac{\partial}{\partial t} H(q,p,t) = -\frac{\partial}{\partial t} L(q,\dot{q},t)_{|_{\dot{q}=\dot{q}(q,p,t)}}. \tag{3.17}$$

Anmerkungen:

(i) Daß die Voraussetzungen von Satz 3.1.2 erfüllt sind, erkennt man leicht (Übungsaufgabe) aus der Struktur von $T(q,\dot{q},t)$ sowie der grundsätzlichen Annahme, daß $U(q,\dot{q},t)$ nur linear[17] von den $\dot{q}^\nu$ abhängt.

(ii) Bei der Lösung von (3.15)/(3.16) werden die q^ν und p_ν formal als unabhängig voneinander behandelt. Die Gültigkeit von (3.15) garantiert dann (nach Satz 3.1.2) den physikalisch richtigen Zusammenhang (1.60) zwischen $p(t)$ und $(q(t), \dot{q}(t), t)$.

(iii) Aus (3.16) und (1.61) erkennt man, daß q^ν genau dann zyklisch ist, wenn $\frac{\partial}{\partial q^\nu} H = 0$, d.h. falls H nicht von den q^ν abhängt.

Aus (3.17) und (1.62) erkennt man[18]

$$\frac{\partial}{\partial t} H = 0 \Longrightarrow \dot{H} = 0 \text{ für Lösungen von } (3.15)/(3.16),$$

was sich natürlich auch direkt nachrechnen läßt. Es sei daran erinnert, daß im $(q,\dot{q})$-Formalismus

$$H = T + U\,, \quad \textbf{falls } U = U(q,t) \textbf{ und } \frac{\partial}{\partial t} x = 0\,,$$

[17] Damit die Q_ν^{e} entspr. (1.54) nur von $q, \dot{q}, t$ und nicht von $\ddot{q}$ abhängen.

[18] Man beachte, daß sogar (3.20) gilt.

gilt (Gleichungen (1.65) und (1.63)), was sich natürlich auch unter Koordinatentransformationen

$$\underbrace{q,\dot{q}}_{\text{in (1.63) benutzt}} \longrightarrow \underbrace{q,p}_{\text{in (3.14) benutzt}}$$

nicht ändert, da T nicht explizit von der Zeit abhängt, also $\frac{\partial}{\partial t}p(q,\dot{q},t) = 0$ und somit $\frac{\partial}{\partial t}\dot{q}(q,p,t) = 0$ gilt.

3.1.2.3 Poisson-Klammer-Formulierung

Für gegebenes $q(t)$ sei unter $p(t)$ stets der Satz von Funktionen

$$p_\nu(t) = p_\nu\left(q(t),\dot{q}(t),t\right) = \frac{\partial}{\partial \dot{q}^\nu} L\left(q(t),\dot{q},t\right)_{|\dot{q}=\dot{q}(t)}$$

verstanden.

Sei nun eine (hinreichend gutartige) Funktion $f(q,p,t)$ gegeben. Für

$$f(t) = f\left(q(t),p(t),t\right)$$

folgt dann[19]

$$\dot{f}(t) = \dot{f}\left(q(t),p(t),\dot{q}(t),\dot{p}(t),t\right)$$

mit

$$\dot{f}(q,p,\dot{q},\dot{p},t) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\nu=1}^{n}\left(\dot{q}^\nu \frac{\partial}{\partial q^\nu} + \dot{p}_\nu \frac{\partial}{\partial p_\nu}\right) f(q,p,t) + \frac{\partial}{\partial t} f(q,p,t)\,.$$

Daher:

$$\left.\begin{matrix}(3.15)\\(3.16)\end{matrix}\right\} \Longrightarrow \dot{f} = \sum_{\nu=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial q^\nu}\frac{\partial H}{\partial p_\nu} - \frac{\partial H}{\partial q^\nu}\frac{\partial f}{\partial p_\nu}\right) + \frac{\partial}{\partial t} f\,.$$

Mit der sog.

$$\boxed{\begin{array}{l}\text{Poisson-}\textbf{\textit{Klammer}}\text{:}\\ \displaystyle\{f,g\}_{q,p} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\nu=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial q^\nu}\frac{\partial g}{\partial p_\nu} - \frac{\partial g}{\partial q^\nu}\frac{\partial f}{\partial p_\nu}\right)\\ \text{für bel. (hinr. gutart.) } f(q,p,t) \text{ und } g(q,p,t)\end{array}} \tag{3.18}$$

ergibt sich somit:

$$\boxed{\begin{array}{c}\textbf{für tatsächliche Bewegung:}\\ \displaystyle\dot{f} = \{f,H\}_{q,p} + \frac{\partial}{\partial t} f\,.\end{array}} \tag{3.19}$$

Umgekehrt folgen natürlich die kanonischen Gleichungen (3.15) bzw. (3.16) als Spezialfälle $f = q^\nu$ bzw. $f = p_\nu$.

WS 1995/96

[19]Vgl. Erläuterung der Schreibweise zu (1.45).

Einsetzen von $f = H$ in (3.19) liefert

$$\boxed{\begin{array}{c}\textbf{für tatsächliche Bewegung:}\\ \dot{H} = \frac{\partial}{\partial t} H\end{array}} \tag{3.20}$$

(im Einklang mit (1.62) und (3.17)); denn die POISSON-Klammer ist offensichtlich antisymmetrisch:[20]

$$\{f, g\}_{q,p} = -\{g, f\}_{q,p} \; . \tag{3.21}$$

Mit der sog. JACOBI-***Identität***

$$\boxed{\left\{f, \{g, h\}_{q,p}\right\}_{q,p} + \left\{g, \{h, f\}_{q,p}\right\}_{q,p} + \left\{h, \{f, g\}_{q,p}\right\}_{q,p} = 0} \tag{3.22}$$

(Beweis als Übungsaufgabe) folgt daraus z.B. der sog. ***Satz von*** POISSON:

$$\{f, H\}_{q,p} = \{g, H\}_{q,p} = 0 \Longrightarrow \left\{\{f, g\}_{q,p}, H\right\}_{q,p} = 0 \, , \tag{3.23}$$

so daß nach (3.19) die POISSON-Klammer u.U. aus bekannten Erhaltungsgrößen neue bildet.
Schließlich seien noch die Relationen

$$\{q^\nu, q^\mu\}_{q,p} = \{p_\nu, p_\mu\}_{q,p} = 0 \; , \quad \{q^\nu, p_\mu\}_{q,p} = \delta_{\nu\mu} \tag{3.24}$$

erwähnt, die zusammen mit (3.19) in der Quantenmechanik eine entscheidende Rolle spielen.

3.2 HAMILTON-JACOBI-Theorie

3.2.1 Kanonische Transformationen

3.2.1.1 Variationsprinzip für die kanonischen Gleichungen

Man sieht unmittelbar, daß die kanonischen Gleichungen (3.15)/(3.16) äquivalent sind zu folgendem Variationsprinzip:

Ein mit den Nebenbedingungen verträglicher (lokaler) Bewegungsablauf $q(t)$ entspricht genau dann der durch H (bzw. L) gegebenen Dynamik, wenn für bel. t_1, t_2

WS 1995/96

[20] Insbesondere gilt also $\{H, H\}_{q,p} = 0$.

(aus dem Definitionsbereich von $q(t)$) gilt:[21]

$$\boxed{\delta \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_\nu p_\nu \dot{q}^\nu - H \right) \mathrm{d}t = 0 \qquad \text{bei unabh. Variation von } q(t) \text{ und } p(t)\,.} \tag{3.25}$$

> **Warnung:** In (3.25) ist unter $\dot{q}^\nu(t)$ die Zeitableitung der Funktion $q^\nu(t)$ zu verstehen, **nicht** jedoch die implizite Funktion $\dot{q}^\nu\left(q(t), p(t), t\right)$.

Genaue Bedeutung von (3.25):

$$\left(\frac{\partial}{\partial s} \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_{\nu=1}^{n} p_\nu(t,s) \frac{\partial}{\partial t} q^\nu(t,s) - H\left(q(t,s), p(t,s), t\right) \right) \mathrm{d}t \right)_{|s=0} = 0 \tag{3.26}$$

für **beliebige** (hinr. gutart.) s-abhängige Variationen $q(t,s), p(t,s)$ der $q(t), p(t)$ mit:

$$q(t,0) = q(t)\,, \quad p(t,o) = p(t)\,,$$
$$q(t_j,s) = q(t_j)\,,\,;p(t_j,s) = p(t_j) \quad \text{für } j = 1,2 \text{ und bel. } s\,.$$

Anmerkungen:

(i) Man kann zeigen (Übungsaufgabe), daß (3.25) auch dann noch für alle Lösungen der kanonischen Gleichungen gilt, wenn man Variation der $p(t_j,s)$ zuläßt.

(ii) Indem man zu H die totale Zeitableitung von $\sum_{\nu=1}^n p_\nu q^\nu$ addiert, sieht man, daß die Verwendung von $\int_{t_1}^{t_2} \left(-\sum_\nu \dot{p}_\nu q^\nu - H\right) \mathrm{d}t$ anstelle von $\int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_\nu p_\nu \dot{q}^\nu - H\right) \mathrm{d}t$ auf ein äquivalentes Variationsprinzip führen würde.

3.2.1.2 Invarianzeigenschaften der kanonischen Gleichungen

In den Lagrange-Gleichungen (3.7) sind die $\dot{q}^\nu$ nur bei Auswertung der partiellen Differentiation formal als unabhängig zu betrachten, sonst sind sie als gewöhnliche Zeitableitung der q^ν aufzufassen. Entsprechend sind mit einer (nicht unbedingt

WS 1995/96

[21] Euler-Lagrange-Gleichungen zu (3.25):

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\frac{\partial}{\partial \dot{q}^\nu} - \frac{\partial}{\partial q^\nu}\right)\left(\sum_\mu p_\mu \dot{q}^\mu - H\right) &= \dot{p}_\nu + \frac{\partial}{\partial q^\nu} H \\ 0 &= \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\frac{\partial}{\partial \dot{p}_\nu} - \frac{\partial}{\partial p_\nu}\right)\left(\sum_\mu p_\mu \dot{q}^\mu - H\right) &= -\dot{q}^\nu + \frac{\partial}{\partial p_\nu} H \end{aligned}$$

dynamisch erlaubten, lokalen) Bewegung $q(t)$ auch die $p(t)$ als kanonisch konjugierte Impulse (1.60) gegeben. Bei (hinreichend gutartigem) Koordinatenwechsel

$$q(t) \longmapsto q'(t) = q'\left(q(t), t\right)\ , \quad q(t) = q\left(q'(t), t\right)\ , \tag{3.27}$$

transformieren sich die $p_\nu(t)$ ***kovariant***,[22] d.h. wie die $\frac{\partial}{\partial q^\nu}$:

$$p_\nu(t) \longmapsto p'_\nu(t) = \sum_{\mu=1}^{n} \frac{\partial q^\mu(q',t)}{\partial q'^\nu}_{|q'=q'(t)} p_\mu(t)\,. \tag{3.28}$$

Beweis: Mit

$$L'(q', \dot q', t) \stackrel{\text{def}}{=} L\left(q(q',t), \dot q(q', \dot q', t), t\right)\ ,$$

gilt

$$p'_\nu(q', \dot q', t) = \frac{\partial}{\partial \dot q'^\nu} L'\left(q', \dot q', t\right) = \sum_{\mu=1}^{n} \frac{\partial \dot q^\mu(q', \dot q', t)}{\partial \dot q'^\nu} \frac{\partial}{\partial \dot q^\mu} L\left(q, \dot q, t\right)_{|q=q(q',t)\,,\ \dot q=\dot q(q',\dot q',t)}$$

Mit

$$\dot q^\mu(q', \dot q', t) = \dot q' \frac{\partial q^\mu(q',t)}{\partial q'^\nu}$$

und somit

$$\frac{\partial \dot q^\mu(q', \dot q', t)}{\partial \dot q'^\nu} = \frac{\partial q^\mu(q',t)}{\partial q'^\nu}$$

folgt daraus gemäß (1.60) die Behauptung. ∎

In den kanonischen Gleichungen (3.15)/(3.16) werden dagegen $q(t)$ und $p(t)$ als völlig unabhängig voneinander behandelt.[23] Daher liegt der Versuch nahe, die kanonischen Gleichungen durch geschickte (lokale, t-abhängige) Transformation

$$\left.\begin{array}{c} q(t) \\ p(t) \end{array}\right\} \longrightarrow \left\{\begin{array}{l} Q(t) = Q\left(q(t), p(t), t\right) \\ P(t) = P\left(q(t), p(t), t\right) \end{array}\right. \tag{3.29}$$

des gesamten Variablensatzes in eine leichter lösbare Form zu bringen. Natürlich soll die Abbildung (3.29) 'hinreichend gutartig' sein und eine 'hinreichend gutartige' Umkehrabbildung

$$\begin{array}{rcl} q(t) &=& q\left(Q(t), P(t), t\right)\ , \\ p(t) &=& p\left(Q(t), P(t), t\right)\,. \end{array} \tag{3.30}$$

WS 1995/96

[22]Daher kann man den physikalischen Momentan-Zustand als Punkt des **Ko**tangentialbündels $T^*\mathcal{M}_t$ über $\mathcal{M}_t$ mit den (lokalen) Koordinaten $\left(q^1(t), \ldots, p_n(t)\right)$ auffassen (siehe Anhang), das man in diesem Zusammenhang auch als ***Phasenraum*** bezeichnet. Den q, p, t-Raum bezeichnet man mitunter als ***erweiterten Phasenraum***.

[23]Der physikalisch korrekte Zusammenhang (1.60) bzw. (3.12) erwies sich als äquivalent zur Gültigkeit von (3.15).

besitzen. Dann bezeichnet man (3.29) als eine (lokale, passive) ***kanonische Transformation***,[24] falls (hinr. gutart.) Funktionen $K(Q,P,t)$ und $F(Q,P,T)$ existieren, mit denen

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\nu=1}^{n} p_\nu(t)\frac{d}{\mathrm{d}t}q^\nu(t) - H\left(q(t),p(t),t\right)\\
&= \sum_{\nu=1}^{n} P_\nu(t)\frac{d}{\mathrm{d}t}Q^\nu(t) - K\left(Q(t),P(t),t\right) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F\left(Q(t),P(t),t\right)
\end{aligned}
\tag{3.31}
$$

für alle (hinreichend gutartigen) $q(t), p(t)$ gilt, die den betreffenden Koordinatenbereich nicht verlassen. Nach 3.2.1.1 (beachte Anmerkung (iii) zu (3.2)) gilt für solche Transformationen offensichtlich:

$$
\left.\begin{matrix}(3.15)\\(3.16)\end{matrix}\right\} \iff \left\{\begin{array}{rcl} \dot Q^\nu(t) &=& \frac{\partial}{\partial P_\nu}K\left(Q(t),P,t\right)_{|P=P(t)}\,,\\ \dot P_\nu(t) &=& -\frac{\partial}{\partial Q^\nu}K\left(Q,P(t),t\right)_{|Q=Q(t)}\,.\end{array}\right.
\tag{3.32}
$$

Die sog. ***Punkttransformationen*** (3.27)/(3.28) sind kanonische Transformationen mit $F=0$ und

$$
\begin{gathered}
Q \stackrel{\text{def}}{=} q'\,,\quad P \stackrel{\text{def}}{=} p'\,,\\
K(Q,P,t) \stackrel{\text{def}}{=} H\left(q(Q,P,t),p(Q,P,t),t\right) + \textstyle\sum_{\nu=1}^{n} P_\nu\,\frac{\partial}{\partial t}Q^\nu(q,t)_{|q=q(Q,t)}\,.
\end{gathered}
$$

Beweis: Aus

$$
\dot Q^\nu(t) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}q'^\nu\left(q(t),t\right) = \sum_{\alpha=1}^{n}\dot q^\alpha(t)\,\frac{\partial q'^\nu(q,t)}{\partial q^\alpha}_{|q=q(t)} + \frac{\partial}{\partial t}q'^\nu(q,t)_{|q=q(t)}
$$

und (3.28) folgt

$$
\sum_{\nu=1}^{n} P_\nu\dot Q^\nu - \sum_{\nu=1}^{n} P_\nu\,\frac{\partial}{\partial t}q'^\nu(q,t)_{|q=q(Q,t)} = \sum_{\mu,\alpha}^{n} p_\alpha \underbrace{\sum_{\nu}^{n}\frac{\partial q^\mu}{\partial q'^\nu}\frac{\partial q'^\nu}{\partial q^\alpha}}_{\delta_{\mu\alpha}}\dot q^\beta = \sum_{\mu=1}^{n} p_\mu\dot q^\mu
$$

und damit die Behauptung. ∎

Zu den einfachsten kanonischen Transformationen gehören diejenigen vom Typ

$$
\begin{array}{rcl}
Q^\nu(t) &\stackrel{\text{def}}{=}& \left\{\begin{array}{l} -p_{\pi(\nu)}(t) \text{ falls } 1\le\nu\le n'\\ \;\;\,q^{\pi(\nu)}(t) \text{ falls } n'\le\nu\le n\end{array}\right.\\
P_\nu(t) &\stackrel{\text{def}}{=}& \left\{\begin{array}{l} q^{\pi(\nu)}(t) \text{ falls } 1\le\nu\le n'\\ p_{\pi(\nu)}(t) \text{ falls } n'\le\nu\le n\end{array}\right.
\end{array}
\tag{3.33}
$$

WS 1995/96

[24]Der Begriff 'kanonische Transformation' wird in der Literatur nicht einheitlich benutzt. Man beachte (3.38).

(π Permutation von $(1, \ldots, n)$, $n' \in \{1, \ldots, n\}$). Hier gilt[25] (3.31) mit

$$K\left(Q(t), P(t), t\right) = H\left(q(t), p(t), t\right)$$

und

$$F(Q, P, t) = -\sum_{\nu=1}^{n'} P_\nu Q^\nu$$

In der Invarianz von (3.15)/(3.16) unter diesen Transformationen kommt die Gleichberechtigung der q und p im kanonischen Formalismus besonders deutlich zum Ausdruck.

3.2.1.3 Erzeugende Funktionen kanonischer Transformationen

Sei (3.29) eine (lokale) kanonische Transformation. Es existieren also K und F mit (3.31). Die $p(t)$ seien durch die $q(t)$ und eine geeignete Auswahl von n-Stück der Koordinaten $Q^1(t), \ldots, P_n(t)$ **lokal** festgelegt. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit[26] kann man annehmen, daß es sich bei diesen Koordinaten um die $P_\nu(t)$ handelt:

$$p(t) = p(q(t), P(t), t)\,.$$

Dann ist die Definition

$$F_2\left(q(t), P(t), t\right) \stackrel{\text{def}}{=} F\left(Q(t), P(t), t\right) + \sum_{\nu=1}^{n} P_\nu(t) Q^\nu(t) \tag{3.34}$$

erlaubt,[27] aus der mit (3.31)

$$\begin{aligned} &\sum_{\nu=1}^{n} p_\nu(t) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} q^\nu(t) - H\left(q(t), p(t), t\right) \\ &= -\sum_{\nu=1}^{n} Q^\nu(t) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} P_\nu(t) - K\left(Q(t), P(t), t\right) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} F_2\left(q(t), P(t), t\right) \end{aligned}$$

und somit nach Auswertung von $\dot{F}_2$

$$\begin{aligned} p_\nu(t) &= \frac{\partial}{\partial q^\nu} F_2\left(q, P(t), t\right)_{|q=q(t)}\,, && (3.35) \\ Q^\nu(t) &= \frac{\partial}{\partial P_\nu} F_2\left(q(t), P, t\right)_{|P=P(t)}\,, && (3.36) \\ K\left(Q(t), P(t), t\right) &= H\left(q(t), p(t), t\right) + \frac{\partial}{\partial t} F_2(q, P, t)_{|q=q(t), P=P(t)} && (3.37) \end{aligned}$$

WS 1995/96

[25] Die Transformation

$$\left.\begin{matrix} q \\ p \end{matrix}\right\} \longrightarrow \left\{\begin{matrix} Q = 2q \\ P = p \end{matrix}\right.$$

läßt zwar auch (3.15)/(3.16) invariant $\left((3.32) \text{ gilt mit } K(Q,P) = H\left(\frac{Q}{2}, P\right)\right)$, ist aber **nicht** kanonisch, da keine Funktion F existiert, für die (3.31) gilt.

[26] Beachte Beispiel (3.33).

[27] Denn $Q^\nu(t) = Q^\nu\left(q(t), p\left(q(t), P(t), t\right), t\right)$.

folgt.[28] Nach Voraussetzung sind die Gleichungen (3.35) eindeutig nach den $P_\nu(t)$ auflösbar.[29] Also ist die Transformation (3.29) entsprechend (3.35), (3.36) durch F_2 bereits eindeutig festgelegt. Daher bezeichnet man F_2 als die ***Erzeugende*** der kanonischen Transformation (3.29).

Beispiel: Für die Punkttransformation (3.27)/(3.28) sind offensichtlich vom Typ (3.35)/(3.36) und ihre erzeugende Funktion (3.34) ist

$$F_2\left(q(t), P(t), t\right) = \sum_{\nu=1}^{n} Q^\nu\left(q(t), t\right) P_\nu(t)\,.$$

Umgekehrt legen offenbar (3.35)/(3.36) bei beliebig vorgegebenem (hinr. gutart.) F_2, für das die Gleichungen (3.35) nach den P_ν eindeutig auflösbar sind, eine Transformation fest, die für **jede** (hinreichend gutartige) HAMILTON-Funktion $H(q,p,t)$ kanonisch ist. Da für einen hinreichend kleinen q,p-Bereich die $p(t)$ stets durch die $q(t)$ und eine geeignete Auswahl von n-Stück der Koordinaten $Q^1(t), \ldots, P_n(t)$ **lokal** festgelegt sind (siehe Anhang), können wir also schließen:

$$\boxed{\text{Ob eine (lokale) Transformation (3.29) kanonisch ist, hängt nicht von der HAMILTON-Funktion } H \text{ ab!}} \tag{3.38}$$

Die kanonischen Transformationen vom Typ (3.35)/(3.36) haben die JACOBI-***Determinante***

$$\frac{\partial\left(Q^1(t), \ldots, P_n(t)\right)}{\partial\left(q^1(t), \ldots, p_n(t)\right)} \stackrel{\text{def}}{=} \det \begin{pmatrix} \frac{\partial Q^1(q,p,t)}{\partial q^1} & \cdots & \frac{\partial Q^1(q,p,t)}{\partial p_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial P_n(q,p,t)}{\partial q^1} & \cdots & \frac{\partial P_n(q,p,t)}{\partial p_n} \end{pmatrix}_{|q=q(t),p=p(t)} = 1\,. \tag{3.39}$$

Beweis: Man kann die Transformation (3.35)/(3.36) in zwei Schritten ausführen:

$$(q,p) \longrightarrow (q,P) \longrightarrow (Q,P)\,.$$

Daher:

$$\frac{\partial\left(Q^1, \ldots, P_n\right)}{\partial\left(q^1, \ldots, p_n\right)} = \frac{\partial\left(Q^1, \ldots, P_n\right)}{\partial\left(q^1, \ldots, P_n\right)} \frac{\partial\left(q^1, \ldots, P_n\right)}{\partial\left(q^1, \ldots, p_n\right)}\,.$$

WS 1995/96

[28]Da die $\dot q(t), \dot P(t)$ zu jedem festen Zeitpunkt unabhängig von den Momentanwerten $q(t), P(t)$ beliebige Werte annehmen können.

[29]Auflösbarkeit von (3.35) nach den $P_\nu \iff$ (3.42) $\iff$ Auflösbarkeit von (3.36) nach den q^ν .

Mit[30]

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial\left(Q^1,\dots,P_n\right)}{\partial(q^1,\dots,P_n)}
&\underset{(3.36)}{=} \det\begin{pmatrix}
\frac{\partial}{\partial q^1}\frac{\partial}{\partial P_1}F & \dots & \frac{\partial}{\partial q^n}\frac{\partial}{\partial P_1}F & \\
\vdots & & \vdots & \mathrm{I\!M} \\
\frac{\partial}{\partial q^1}\frac{\partial}{\partial P_n}F & \dots & \frac{\partial}{\partial q^n}\frac{\partial}{\partial P_n}F & \\
 & 0_n & & 1\!\!1_n
\end{pmatrix} \\
&= \det\begin{pmatrix}
1\!\!1_n & & 0_n & \\
 & \frac{\partial}{\partial P_1}\frac{\partial}{\partial q^1}F & \dots & \frac{\partial}{\partial P_n}\frac{\partial}{\partial q^1}F \\
\mathrm{I\!M}' & \vdots & & \vdots \\
 & \frac{\partial}{\partial P_1}\frac{\partial}{\partial q^n}F & \dots & \frac{\partial}{\partial P_n}\frac{\partial}{\partial q^n}F
\end{pmatrix} \\
&\underset{(3.35)}{=} \frac{\partial\left(q^1,\dots,p_n\right)}{\partial(q^1,\dots,P_n)} \\
&= \left(\frac{\partial\left(q^1,\dots,P_n\right)}{\partial(q^1,\dots,p_n)}\right)^{-1}
\end{aligned}
$$

folgt daraus die Behauptung. ▮

3.2.1.4 Invarianz der Poisson-Klammern unter kanonischen Transformationen

Nachdem klar ist, daß die Kanonizität einer (lokalen) Transformation nicht von der Hamilton-Funktion abhängt, läßt sich leicht zeigen, daß (lokal) für beliebige (hinreichend gutartige) Funktionen f, g gilt:[31]

$$
\Big((q(t),p(t)) \longmapsto (Q(t),P(t)) \text{ kanonisch}\Big) \implies \{f,g\}_{q,p} = \{f,g\}_{Q,P} \,. \tag{3.40}
$$

Beweisskizze: Sei $(q(t),p(t)) \longmapsto (Q(t),P(t))$ eine kanonische Transformation mit der erzeugenden Funktion F_2 und sei $\hat{t}$ ein beliebig vorgegebener Zeitpunkt. Dann ist

$$
\left.\begin{array}{c} q(t) \\ p(t) \end{array}\right\} \longmapsto \left\{\begin{array}{l} \hat{Q}(t) \stackrel{\text{def}}{=} Q(q(t),p(t),\hat{t}) \\ \hat{P}(t) \stackrel{\text{def}}{=} P(q(t),p(t),\hat{t}) \end{array}\right.
$$

nach 3.2.1.3 eine kanonische Transformation mit $(\hat{Q}(\hat{t}),\hat{P}(\hat{t})) = (Q(\hat{t}),P(\hat{t}))$ (und der erzeugenden Funktion $\hat{F}_2(q(t),\hat{P}(t),t) = F_2(q(t),\hat{P}(t),\hat{t})$). Zum Beweis von

$$
\{f,g\}_{q,p}(q,p,\hat{t}) = \{f,g\}_{Q,P}(Q(q,p,\hat{t}),P(q,p,\hat{t}),\hat{t})
$$

WS 1995/96

[30]Die Werte der Determinanten sind unabhängig von den $n \times n$-Matrizen $\mathrm{I\!M}$ und $\mathrm{I\!M}'$.

[31]Genaue Bedeutung von (3.40):

$$
\{f,g\}_{q,p} = \sum_{\nu=1}^{n}\left(\frac{\partial F(Q,P,t)}{\partial Q^\nu}\frac{\partial G(Q,P,t)}{\partial P_\nu} - \frac{\partial G(Q,P,t)}{\partial Q^\nu}\frac{\partial F(Q,P,t)}{\partial P_\nu}\right)_{|Q=Q(q,p,t)\,,\;P=P(q,p,t)}
$$

mit

$$
F(Q,P,t) \stackrel{\text{def}}{=} f\big(q(Q,P,t),p(Q,P,t),t\big)\,, \quad G(Q,P,t) \stackrel{\text{def}}{=} g\big(q(Q,P,t),p(Q,P,t),t\big)\,.
$$

kann man also ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen, daß die kanonische Transformation $(q(t), p(t)) \longmapsto (Q(t), P(t))$ nicht explizit von der Zeit abhängt ($\frac{\partial}{\partial t} F_2 = 0$). Offensichtlich ist außerdem, daß man f und g als nicht explizit zeitabhängig voraussetzen kann. Sei unter diesen Voraussetzungen $q(t), p(t)$ eine (lokale) Lösung des Differentialgleichungssystems

$$\begin{aligned} \dot{q}^\nu &= +\tfrac{\partial}{\partial p_\nu} g \,, \\ \dot{p}_\nu &= -\tfrac{\partial}{\partial q^\nu} g \end{aligned}$$

zu den Anfangsbedingungen

$$q(\hat{t}) = \hat{q} \,, \quad p(\hat{t}) = \hat{p} \,.$$

Da $(q, p) \longmapsto (Q, P)$ kanonisch ist, gilt für $Q(t) = Q(q(t), p(t))$, $P(t) = P(q(t), p(t))$ entsprechend

$$\begin{aligned} \dot{Q}^\nu &= +\tfrac{\partial}{\partial P_\nu} G \,, \\ \dot{P}_\nu &= -\tfrac{\partial}{\partial Q^\nu} G \,, \quad G(Q, P) \stackrel{\text{def}}{=} g(q(Q, P), p(Q, P)) \,, \end{aligned}$$

und somit entsprechend (3.19)

$$\{f, g\}_{q,p} (q(t), p(t), t) = \dot{f}(t) = \{f, g\}_{Q,P} (Q(q(t), p(t)), P(q(t), p(t)), t)$$

für die betrachtete (lokale) Bewegung $q(t), p(t)$, insbesondere also

$$\{f, g\}_{q,p} \left(\hat{q}, \hat{p}, \hat{t}\right) = \{f, g\}_{Q,P} (Q(\hat{q}, \hat{p}), P(\hat{q}, \hat{p}), \hat{t}) \,.$$

Da $\hat{t}$, $\hat{q}$ und $\hat{p}$ (im lokalen Koordinatenbereich) beliebig vorgebbar sind, ist damit die Behauptung bewiesen. ∎

Umgekehrt läßt sich zeigen, daß $(q(t), p(t)) \longmapsto (Q(t), P(t))$ kanonisch ist, falls $\{f, g\}_{Q,P} = \{f, g\}_{q,p}$ für alle (hinreichend gutartigen) f, g gilt (siehe Anhang).

3.2.2 Hamilton-Jacobi-Gleichung

3.2.2.1 Bedeutung der Gleichung

Die kanonischen Gleichungen sind offenbar gelöst, wenn es gelingt, eine kanonische Transformation (3.29) zu finden, für die (3.31) mit $K = 0$ gilt; denn dann sind die $Q^\nu(t)$ und $P_\nu(t)$ nach (3.32) konstant[32] und die Lösungen von (3.15)/(3.16) somit entsprechend (3.30) durch

$$\begin{aligned} q(t) &= q\left(Q(t_0), P(t_0), t\right) \,, \\ p(t) &= p\left(Q(t_0), P(t_0), t\right) \end{aligned}$$

WS 1995/96

[32]Naheliegende Verallgemeinerung: $K = K(P) \rightsquigarrow \dot{P} = \ddot{Q} = 0$

gegeben, wobei die $Q(t_0), P(t_0)$ entsprechend (3.29) durch die Anfangswerte $q(t_0), p(t_0)$ gegeben sind.

Eine Transformation der Form (3.35)/(3.36) ist nach (3.37) offensichtlich von der gewünschten Art, wenn[33] die Erzeugende F_2 die sogenannte

$$\boxed{\begin{array}{l}\text{HAMILTON-JACOBI-}\textbf{\textit{Gleichung}}:\\ \frac{\partial}{\partial t}F_2(q,P,t) + H\left(q, \nabla_q F_2(q,P,t), t\right) = 0\end{array}} \tag{3.41}$$

erfüllt und die Gleichung (3.35) eindeutig nach den P_ν auflösbar sind; d.h. **lokal**:

$$0 \neq \det \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial P_1}\frac{\partial}{\partial q^1}F_2 & \dots & \frac{\partial}{\partial P_n}\frac{\partial}{\partial q^1}F_2 \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial}{\partial P_1}\frac{\partial}{\partial q^n}F_2 & \dots & \frac{\partial}{\partial P_n}\frac{\partial}{\partial q^n}F_2 \end{pmatrix} . \tag{3.42}$$

Eine P-abhängige Schar von Funktionen $F_2(q,P,t)$ der (q,t), die den Bedingungen (3.41) und (3.42) genügt, bezeichnet man als ein ***vollständiges Integral*** der partiellen Differentialgleichung 1. Ordnung

$$\frac{\partial}{\partial t}f(q,t) + H\left(q, \nabla_q f(q,t), t\right) = 0$$

(die von f selbst frei[34] ist). In der Theorie der partiellen Differentialgleichungen 1. Ordnung wird gezeigt,[35] daß für 'vernünftige' H stets (lokal) ein vollständiges Integral existiert; d.h.:

> Es existiert (lokal) stets eine Erzeugende F_2, die (3.41)/(3.42) erfüllt. Für jede kanonische Transformation (3.29) vom Typ (3.35)/(3.36), deren Erzeugende F_2 (3.41)/(3.42) erfüllt, gilt[36]
>
> $$\left.\begin{array}{c}(3.15)\\(3.16)\end{array}\right\} \Longleftrightarrow \dot{Q}(t) = \dot{P}(t) = 0$$

Daraus folgt der sog.

Satz von LIOUVILLE: *Für Lösungen $(q(t), p(t))$ der kanonischen Gleichungen (3.15)/(3.16) gilt*

$$1 = \frac{\partial\left(q^1(t_2), \dots, p_n(t_2)\right)}{\partial\left(q^1(t_1), \dots, p_n(t_1)\right)}$$

WS 1995/96

[33] Addition einer Funktion zu F_2, die nur von t abhängt, würde die kanonische Transformation nicht ändern.

[34] In die Differentialgleichung gehen nur partielle Ableitungen von f ein, nicht f selbst.

[35] Siehe z.B. [Kam65, Abschnitt 12.9].

[36] **Lokal** sind also alle mechanischen Systeme gleicher Anzahl der Freiheitsgrade äquivalent!

für beliebige Zeitpunkte t_1, t_2 (im Definitionsbereich der q, p).

Beweis: Es existiert eine kanonische Transformation, für die aus (3.15)/(3.16)

$$Q(t_1) = Q(t_2)\,,\ P(t_1) = P(t_2)$$

folgt. Für diese gilt dann

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\big(q^1(t_2),\dots,p_n(t_2)\big)}{\partial(q^1(t_1),\dots,p_n(t_1))} &= \frac{\partial\big(q^1(t_2),\dots,p_n(t_2)\big)}{\partial(Q^1(t_2),\dots,P_n(t_2))}\cdot\frac{\partial\big(Q^1(t_1),\dots,P_n(t_1)\big)}{\partial(q^1(t_1),\dots,p_n(t_1))}\\
&= \left(\frac{\partial\big(Q^1(t_2),\dots,P_n(t_2)\big)}{\partial(q^1(t_2),\dots,p_n(t_2))}\right)^{-1}\cdot\frac{\partial\big(Q^1(t_1),\dots,P_n(t_1)\big)}{\partial(q^1(t_1),\dots,p_n(t_1))}
\end{aligned}$$

Mit (3.39) folgt daraus die Behauptung. ∎

Anmerkungen:

(i) Der Satz von LIOUVILLE besagt, daß Phasenraumvolumina bei der kanonischen Zeitentwicklung erhalten bleiben.

(ii) Daraus folgt, daß für eine statistische Gesamtheit gleichartiger Systeme, die sich unabhängig voneinander entspr. (3.15)/(3.16) bewegen, die Systemzahldichte in der Umgebung jedes Einzelsystems im Phasenraum zeitlich konstant bleibt.

(iii) Da die Umkehrtransformation einer (lokalen) kanonischen Transformation wiederum kanonisch ist, folgt entsprechend, daß der (lokale) Fluß (entsprechend Abschnitt 5.1.1 der Einf. i.d. Theor. Phys.) des (lokalen) HAMILTON***schen Vektorfeldes***

$$\vec{H}_t(q,p) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} +\frac{\partial}{\partial p_1}H(p,q,t)\\ \vdots \\ +\frac{\partial}{\partial p_n}H(p,q,t)\\ -\frac{\partial}{\partial q^1}H(p,q,t)\\ \vdots \\ -\frac{\partial}{\partial q^n}H(p,q,t)\end{pmatrix}$$

über dem Phasenraum selbst eine Schar (lokaler) kanonischer Transformationen ist. Eine Lösung der kanonischen Gleichung würde daher auch ein vollständiges Integral der HAMILTON-JACOBI-Gleichung liefern.[37]

Im Zusammenhang mit Anmerkung (i) von Interesse ist der folgende Satz:

WS 1995/96

[37]Man wähle F_2 als Erzeugende der kanonischen Transformation auf die Anfangswerte zu einem fest gewählten Zeitpunkt und addiere dazu gegebenenfalls eine geeignete Funktion, die nur von der Zeit abhängt.

Poincarésches **Wiederkehrtheorem:** *Sei F eine umkehrbare, stetige Abbildung eines beschränkten Gebietes $\mathcal{G}$ des $\mathbb{R}^{n'}$ in sich, die volumenerhaltend ist:*

$$|F(\mathcal{G}')| = |\mathcal{G}'| \quad \text{für alle einfachen Teilgebiete } \mathcal{G}' \subset \mathcal{G}\,.$$

Dann existieren zu jedem einfachen Teilgebiet $\mathcal{G}' \subset \mathcal{G}$ ein $\vec{x} \in \mathcal{G}'$ und eine natürliche Zahl N mit $F^N(\vec{x}) \in \mathcal{G}'$.

Beweis: Sei ein einfaches Teilgebiet $\mathcal{G}' \subset \mathcal{G}$ beliebig vorgegeben. Dann können die Mengen $F^j(\mathcal{G}') \subset \mathcal{G}$, $j = 1, 2, \ldots$, nicht alle paarweise disjunkt sein, da $\mathcal{G}$ endliches Volumen hat. Es existieren also natürliche Zahlen k , l mit

$$F^l\left(F^{k-l}(\mathcal{G}') \cap \mathcal{G}'\right) = F^k(\mathcal{G}') \cap F^l(\mathcal{G}') \neq \emptyset$$

und somit

$$F^{k-l}(\mathcal{G}') \cap \mathcal{G}' \neq \emptyset\,.$$

Es existiert also ein $\vec{x} \in \mathcal{G}'$ mit $F^N(\mathcal{G}') \in \mathcal{G}'$ für $N = k - l$. ∎

Für ein konservatives Mehrteilchensystem ohne Nebenbedingungen mit der Hamilton-Funktion

$$H(x,p) = \frac{1}{2m}\,|p|^2 + U(x)$$

läßt der Fluß des zugehörigen Hamiltonschen Vektorfeldes für jeden Energiewert E das Gebiet

$$\left\{(x,p) \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N : \, H(x,p) \leq E\right\}$$

des Phasenraumes invariant, das im Falle

$$|x| \text{ hinreichend groß} \implies V(x) > E$$

beschränkt ist. Demnach ließe es sich durch beliebig geringfügige Änderung der Anfangsbedingungen beim Jouleschen Expansionsexperiment einrichten, daß ein Zeitpunkt existiert, zu dem die Gasmoleküle von selbst alle in die Ausgangskammer zurückgekehrt sind – in scheinbarem Widerspruch zum zweiten Hauptsatz der Thermodynamik.

Bzgl. weiterer Anwendungen des Poincaréschen Wiederkehrtheorems siehe [Arn88, Abschnitt 3.5.5].

3.2.2.2 Beispiel: Lösung durch Separationsansatz in Kugelkoordinaten

Betrachtet sei ein Massenpunkt m ohne Nebenbedingungen, auf den nur die Potentialkraft $-\mathrm{grad}\,U$ wirkt, in Kugelkoordinaten r, ϑ, φ. Die Lagrange-Funktion ist

$$L(r,\vartheta,\varphi,\dot r,\dot\vartheta,\dot\varphi) == \frac{m}{2}\left(\dot r^2 + r^2\,\dot\vartheta^2 + r^2\,\sin^2\vartheta\,\dot\varphi^2\right) - U(r,\vartheta,\varphi)\,,$$

ihre LEGENDRE-Transformierte, die HAMILTON-Funktion, also

$$H(r,\vartheta,\varphi,p_r,p_\vartheta,p_\varphi) = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\vartheta^2}{r^2} + \frac{p_\varphi^2}{r^2\,\sin^2\vartheta}\right) + U(r,\vartheta,\varphi)\,,$$

mit den kanonisch konjugierten Impulsen

$$\begin{array}{lclcl} p_r & \stackrel{\text{def}}{=} & \frac{\partial}{\partial \dot r}L & = & m\,\dot r\,, \\ p_\vartheta & \stackrel{\text{def}}{=} & \frac{\partial}{\partial \dot\vartheta}L & = & m\,r^2\,\dot\vartheta\,, \\ p_\varphi & \stackrel{\text{def}}{=} & \frac{\partial}{\partial \dot\varphi}L & = & m\,r^2\,\sin^2\vartheta\,\dot\varphi\,. \end{array}$$

Für U der Form

$$U(r,\vartheta,\varphi) = a(r) + \frac{b(\vartheta)}{r^2}$$

ergibt sich mit dem **Separationsansatz**

$$\begin{array}{l} F_2(r,\vartheta,\varphi,P_r,P_\vartheta,P_\varphi,t) \\ = S_1(r;P_r,P_\vartheta,P_\varphi) + S_2(\vartheta;P_r,P_\vartheta,P_\varphi) + S_3(\varphi;P_r,P_\vartheta,P_\varphi) - E(P_r,P_\vartheta,P_\varphi)t \end{array}$$

für die HAMILTON-JACOBI-Gleichung:

$$\left(\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial r}S_1\right)^2 + a\right) + \frac{1}{2m\,r^2}\left(\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta}S_2\right)^2 + 2m\,b\right) + \frac{1}{2m\,r^2\,\sin^2\vartheta}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}S_3\right)^2 = E\,.$$

Daraus folgt zunächst, daß

$$p_\varphi = \frac{\partial}{\partial\varphi}S_3$$

nur von $(P_r,P_\vartheta,P_\varphi)$ abhängt; d.h. wir können S_3 in der Form

$$S_3(\varphi;P_r,P_\vartheta,P_\varphi) = p_\varphi(P_r,P_\vartheta,P_\varphi)\varphi$$

ansetzen.[38] Dann muß aber auch eine Funktion $\beta(P_r,P_\vartheta,P_\varphi)$ existieren mit

$$\begin{array}{lcl} \left(\frac{\partial}{\partial\vartheta}S_2(\vartheta;P_r,P_\vartheta,P_\varphi)\right)^2 + 2m\,b(\vartheta) + \frac{p_\varphi^2(P_r,P_\vartheta,P_\varphi)}{\sin^2\vartheta} & = & \beta(P_r,P_\vartheta,P_\varphi)\,, \\ \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial r}S_1(r;P_r,P_\vartheta,P_\varphi)\right)^2 + a(r) + \frac{\beta(P_r,P_\vartheta,P_\varphi)}{2m\,r^2} & = & E(P_r,P_\vartheta,P_\varphi)\,. \end{array}$$

Indem wir

$$P_r = E\,,\quad P_\vartheta = \beta\,,\quad P_\varphi = p_\varphi$$

WS 1995/96

[38] Addition einer Funktion von $P_r, P_\vartheta, P_\varphi$ würde keine Vorteile bringen.

wählen, führt Integration schließlich auf das vollständige[39] Integral

$$
\begin{aligned}
&F_2(r,\vartheta,\varphi,P_r,P_\vartheta,P_\varphi,t)\\
&= -P_r t + P_\varphi\,\varphi + \int_{\vartheta_0}^{\vartheta}\sqrt{P_\vartheta - 2m\,b(\vartheta') - \frac{P_\varphi^2}{\sin^2\vartheta'}}\,\mathrm{d}\vartheta' + \int_{r_0}^{r}\sqrt{2m(P_r - a(r')) - \frac{P_\vartheta}{(r')^2}}\,\mathrm{d}r'
\end{aligned}
$$

der HAMILTON-JACOBI-Gleichung.

Gemäß (3.36) sind damit die dynamisch erlaubten Bewegungen implizit durch

$$
\begin{aligned}
-t + \int_{r_0}^{r(t)} \frac{m\,\mathrm{d}r'}{\sqrt{2m\big(P_r - a(r')\big) - \frac{P_\vartheta}{(r')^2}}} &= Q_r = const.\,,\\
\frac{1}{2}\int_{\vartheta_0}^{\vartheta(t)} \frac{\mathrm{d}\vartheta'}{\sqrt{P_\vartheta - 2m\,b(\vartheta') - \frac{P_\varphi^2}{\sin^2\vartheta'}}} - \frac{1}{2}\int_{r_0}^{r(t)} \frac{\mathrm{d}r'}{(r')^2\sqrt{2m\big(P_r - a(r')\big) - \frac{P_\vartheta}{(r')^2}}} &= Q_\vartheta = const.\,,\\
\varphi(t) - \int_{\vartheta_0}^{\vartheta(t)} \frac{P_\varphi\,\mathrm{d}\vartheta'}{\sin^2\vartheta'\sqrt{P_\vartheta - 2m\,b(\vartheta') - \frac{P_\varphi^2}{\sin^2\vartheta'}}} &= Q_\varphi = const.
\end{aligned}
$$

gegeben. Die erste dieser Gleichungen entspricht Gleichung (3.93) d. Einf. i.d. Theor. Physik.

3.2.3 Übergang zur Quantenmechanik

3.2.3.1 Analogie zur Optik

Im folgenden sei nur ein konservatives 1-Teilchen-System ohne Nebenbedingungen in karthesischen Koordinaten $\vec{x}$ betrachtet. Die HAMILTONsche Funktion ist also

$$H(\vec{x},\vec{p}) = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{x})$$

und der (wegen $\frac{\partial}{\partial t}H = 0$ mögliche) Ansatz

$$F_2(\vec{x},\vec{P},t) = S(\vec{x},\vec{P}) - Et\,,\quad P_1 = E \tag{3.43}$$

für eine Lösung von (3.41)/(3.42) führt (lokal!) auf die partielle Differentialgleichung

$$\left(\vec{\nabla}_{\vec{x}} S(\vec{x},\vec{P})\right)^2 = 2m\,(E - V(\vec{x})) \tag{3.44}$$

WS 1995/96

[39] Daß die Vollständigkeitsbedingung

$$0 \neq \det\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial P_r}\frac{\partial}{\partial r}F_2 & \frac{\partial}{\partial P_\vartheta}\frac{\partial}{\partial r}F_2 & \frac{\partial}{\partial P_\varphi}\frac{\partial}{\partial r}F_2\\ \frac{\partial}{\partial P_r}\frac{\partial}{\partial \vartheta}F_2 & \frac{\partial}{\partial P_\vartheta}\frac{\partial}{\partial \vartheta}F_2 & \frac{\partial}{\partial P_\varphi}\frac{\partial}{\partial \vartheta}F_2\\ \frac{\partial}{\partial P_r}\frac{\partial}{\partial \varphi}F_2 & \frac{\partial}{\partial P_\vartheta}\frac{\partial}{\partial \varphi}F_2 & \frac{\partial}{\partial P_\varphi}\frac{\partial}{\partial \varphi}F_2 \end{pmatrix} \underset{(3.36)}{=} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r}Q_r & \frac{\partial}{\partial r}Q_\vartheta & \frac{\partial}{\partial r}Q_\varphi\\ \frac{\partial}{\partial \vartheta}Q_r & \frac{\partial}{\partial \vartheta}Q_\vartheta & \frac{\partial}{\partial \vartheta}Q_\varphi\\ \frac{\partial}{\partial \varphi}Q_r & \frac{\partial}{\partial \varphi}Q_\vartheta & \frac{\partial}{\partial \varphi}Q_\varphi \end{pmatrix}$$

für einen geeigneten (vom betrachteten r,ϑ,φ-Bereich abhängigen) P-Bereich erfüllt ist, erkennt man sofort aus der nachfolgenden Angabe der Q-Funktionen.

Nach (3.35) folgt daraus

$$\|\vec{p}\|^2 = 2m\,(E - V(\vec{x})) \tag{3.45}$$

und somit $E = H(\vec{x}, \vec{p})$ (im Einklang mit (3.20)); d.h. für dynamisch erlaubte Bewegungen ist E als Energie zu interpretieren.

Gleichung (3.44) hat (für fest gewähltes $\vec{P}$) die gleiche Gestalt wie die sog. ***Eikonal-Gleichung***:

$$(\operatorname{grad} L(\vec{x}))^2 = (n(\vec{x}))^2 \tag{3.46}$$

Der Zusammenhang von (3.46) mit der skalaren Wellengleichung der Optik **inhomogener** (isotroper, dispersionsfreier) Medien

$$-\triangle_{\vec{x}}\Phi(\vec{x}, t) + \left(\frac{n(\vec{x})}{c}\right)^2 \left(\frac{\partial}{\partial t}\right)^2 \Phi(\vec{x}, t) = 0\,, \tag{3.47}$$

in der c die Vakuumlichtgeschwindigkeit und $n(\vec{x})$ den Brechungsindex des optischen Mediums bezeichnet, ist folgender:

Man macht für die Welle $\Phi(\vec{x}, t)$ den Ansatz

$$\Phi(\vec{x}, t) = \exp\left(A(\vec{x}) + ik_0\,(L(\vec{x}) - ct)\right) \tag{3.48}$$

mit **reellen** A, L. Dabei ist $A(\vec{x})$ der ln der Amplitude und $L(\vec{x})$, die sog. ***optische Weglänge*** (auch ***Eikonal*** genannt), beschreibt die Flächen konstanter Phase

$$k_0\,(L(\vec{x}) - ct) = \varphi = \text{konst.}\,,$$

auch ***Wellenfronten*** genannt.
Wegen

$$\begin{aligned}
\triangle\Phi &= \left(\triangle(A + ik_0L) + \left(\vec{\nabla}(A + ik_0L)\right)^2\right)\Phi \\
&= \left(\triangle A + \left(\vec{\nabla}A\right)^2 - \left(k_0\vec{\nabla}L\right)^2 + ik_0\left(\triangle L + 2(\vec{\nabla}A)\cdot\vec{\nabla}L\right)\right)\Phi
\end{aligned}$$

ist (3.47) äquivalent zur Gültigkeit von

$$\triangle L + 2(\vec{\nabla}A)\cdot\vec{\nabla}L = 0$$

und

$$\triangle A + (\vec{\nabla}A)^2 + k_0^2\left(n^2 - (\vec{\nabla}L)^2\right) = 0\,.$$

Daraus ergibt sich im geometrisch optischen Bereich

$$k_0 \gg |\operatorname{grad} n(\vec{x})|\;,\; \left|\operatorname{grad} \vec{A}(\vec{x})\right| \quad \forall\,\vec{x}$$

(3.46) als konsistente **Näherungsgleichung** für L.

Die Lichtstrahlen, nach der Korpuskulartheorie des Lichtes die Bahnkurven der Lichtteilchen, sind die Orthogonaltrajektorien der Wellenfronten. Auch das steht in Analogie zur Mechanik, wo die Teilchenbahnen **zu festem** $\vec{p}$ wegen

$$\begin{aligned}\vec{p} &\underset{(3.35)}{=} \vec{\nabla}_{\vec{x}} F_2(\vec{x}, \vec{P}, t) \\ &\underset{(3.43)}{=} \vec{\nabla}_{\vec{x}} S(\vec{x}, \vec{P})\end{aligned}$$

die Flächen

$$S(\vec{x}, \vec{P}) = \text{konst.}$$

($\hat{=}$ Wellenfronten!) senkrecht schneiden.[40]

> **Warnung:** Die Teilchengeschwindigkeit ($\approx$ ***Gruppengeschwindigkeit*** der Welle) stimmt i.a. nicht mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit der Wellenfronten (***Phasengeschwindigkeit***) überein! Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der $F_2 =$ konst.-Flächen ist z.B.[41] $\frac{E}{|\vec{p}|}$ (**halbe** Teilchengeschwindigkeit, **falls** $V = 0$).

3.2.3.2 Die Schrödinger-Gleichung

Aufgrund o.a. Analogie lag es (für Schrödinger) **nach** experimenteller Entdeckung der Wellennatur der Materie nahe, eine Wellentheorie aufzustellen, deren geometrisch-optische Näherung die klassische Mechanik ist:

Dabei sollte

$$\hbar^{-1} \left(S(\vec{x}, \vec{P}) - Et \right) ,$$

wobei der Faktor $\hbar$ aus Dimensionsgründen notwendig ist, die Rolle der zeitabhängigen Wellenphase

$$k_0 \left(L(\vec{x}) - ct \right)$$

von (3.48) übernehmen. Entsprechend ist $k_0 c$ durch $\frac{E}{\hbar}$ sowie $k_0 L(\vec{x})$ durch $\frac{S(\vec{x},\vec{P})}{\hbar}$ und somit nach (3.44)/(3.46) $\left(k_0 n(\vec{x})\right)^2$ durch $\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(\vec{x})\right)$ zu ersetzen. Dann gehen

WS 1995/96

[40]Allerdings schränkt die Wahl von $\vec{P}$ die Menge der tatsächlich möglichen Teilchenbahnen i.a. stark ein! Z.B. muß $E - V(\vec{x}) > 0$ für dynamisch erlaubte Bewegungen gelten.

[41]Für eine (i.a. mit der Dynamik unverträgliche) Bewegung $\vec{x}(t)$ mit Wellenfrontgeschwindigkeit ($\sim \vec{\nabla}_{\vec{x}} F_2$) gilt nämlich:

$$0 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} F_2 \underset{(3.43)}{=} \dot{\vec{x}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{x}} S - E \underset{(3.35)}{=} \dot{\vec{x}} \cdot \vec{p} - E \implies \left|\dot{\vec{x}}\right| = \frac{E}{|\vec{p}|} .$$

die zu (3.47)/(3.48) äquivalenten Gleichungen

$$\Phi(\vec{x},t) = e^{-ik_0 ct}\Phi(\vec{x})$$
$$\triangle_{\vec{x}}\Phi(\vec{x}) + \left(k_0 n(\vec{x})\right)^2 \Phi(\vec{x}) = 0$$

über in die Gleichungen[42]

$$\Psi(\vec{x},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\Psi(\vec{x}) \tag{3.49}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_{\vec{x}} + V(\vec{x})\right)\Psi(\vec{x}) = E\Psi(\vec{x}) \tag{3.50}$$

für die gesuchte ($\vec{P}$-abhängige!) Materiewelle $\Psi(\vec{x},t)$.

Gleichung (3.50) ist die sog. ***zeitunabhängige*** SCHRÖDINGER-***Gleichung***, die sich auch in der Form

$$H(\vec{\boldsymbol{p}},\vec{\boldsymbol{x}})\Psi(\vec{x}) = E\,\Psi(\vec{x})$$

schreiben läßt, wobei die durch

$$\vec{\boldsymbol{p}}\Psi(\vec{x}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{\vec{x}}\Psi(\vec{x})\,, \quad \vec{\boldsymbol{x}}\Psi(\vec{x}) \stackrel{\text{def}}{=} \vec{x}\,\Psi(\vec{x})$$

für hinreichend gutartige $\Psi(\vec{x})$ definierten Operatoren $\boldsymbol{p}_j$, $\boldsymbol{x}^j$ den (3.24) entsprechenden Vertauschungsrelationen

$$\left(\boldsymbol{p}_j\boldsymbol{p}_k - \boldsymbol{p}_k\boldsymbol{p}_j\right) = \left(\boldsymbol{x}^j\boldsymbol{x}^k - \boldsymbol{x}^k\boldsymbol{x}^j\right) = 0\,, \quad i\hbar\left(\boldsymbol{x}^j\boldsymbol{p}_k - \boldsymbol{p}_k\boldsymbol{x}^j\right) = \delta^j_k$$

genügen.

Anstelle der (3.47) entspr. E-abhängigen Wellengleichung benutzt man nun besser die für (3.49) zu (3.50) äquivalente

$$\boxed{\begin{array}{c}\textbf{\textit{zeitabhängige}}\ \text{SCHRÖDINGER-}\textbf{\textit{Gleichung}}\text{:}\\ H(\vec{\boldsymbol{p}},\vec{\boldsymbol{x}})\Psi(\vec{x},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{x},t)\,,\end{array}} \tag{3.51}$$

die nun wieder die Superposition von Lösungen unterschiedlicher Frequenzen erlaubt.

Wenn man die Wellenfunktionen in der Form

$$\Psi(\vec{x},t) = A(\vec{x},t)\,e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{x},t)}$$

mit reellen A,S schreibt, dann ist die komplexe Gleichung (3.51) (für hinreichend gutartige A,S) äquivalent zu den beiden reellen Gleichungen[43]

$$A\frac{\partial}{\partial t}S + A\frac{\left(\vec{\nabla}S\right)^2}{2m} + AV = \frac{\hbar^2}{2m}\Delta A \tag{3.52}$$

WS 1995/96

[42]Dem geometrisch-optischen Bereich entspricht $\hbar \ll 1$.

[43]Man multipliziere (3.51) mit $e^{-\frac{i}{\hbar}S(\vec{x},t)}$.

und

$$m\frac{\partial}{\partial t}A + (\vec{\nabla}A)\cdot(\vec{\nabla}S) + \frac{A}{2}\Delta S = 0\,. \tag{3.53}$$

Mit

$$\jmath \stackrel{\text{def}}{=} \Re\left(\overline{\Psi}\frac{\vec{\boldsymbol{p}}}{m}\Psi\right) = \frac{1}{m}A^2\vec{\nabla}S\,, \quad \rho \stackrel{\text{def}}{=} |\Psi|^2 = A^2$$

wird (3.53), nach Multiplikation mit $\frac{2}{m}A$, zur Kontinuitätsgleichung

$$\dot{\rho} + \operatorname{div}\jmath = 0$$

und (3.52) geht für $\hbar \to 0$ über in die Hamilton-Jacobi-Gleichung für S:

$$\frac{\partial}{\partial S} + \underbrace{\frac{\left(\vec{\nabla}S\right)^2}{2m} + V}_{=H(\vec{x},\operatorname{grad}S)} = 0\,.$$

Die gesamte physikalische Interpretation von (3.51) läßt sich aus der Annahme ableiten, daß $|\Psi(\vec{x},t)|^2$ die Ortswahrscheinlichkeitsdichte zum Zeitpunkt t ist; d.h. daß für einfache Gebiete $\mathcal{G} \subset \mathbb{R}^3$

$$\int_{\mathcal{G}} |\Psi(\vec{x},t)|^2 \, \mathrm{d}V_{\vec{x}} = \text{Wahrscheinlichkeit für Position innerhalb } \mathcal{G} \text{ zur Zeit } t$$

gilt.[44]

WS 1995/96

[44] Siehe z.B. [Mie74] und [Lüc95, Abschnitt 5].