19.11.

19.11.2008

$$Q = Q(q, p, t)$$ Punkttrafos

Nicht nur Orts-, sondern auch die Impulskoordinaten transformieren.

Wir wollen jetzt innerhalb der Gesamtheit der p- und q- Koordinaten transformieren.

Hamiltonsche Gleichungen

$$\boxed{\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}}$$

<u>Definition:</u> Umkehrbare Transformation

$$Q = Q(q, p, t)\ ; \ P = P(q, p, t),$$

welche die Hamiltonsche Form der Bewegungsgleichungen mit einer zu den Q, P gehörigen (neuen) Hamiltonfunktion $K(Q, P, t)$ invariant lassen

$$\dot{Q} = \frac{\partial K}{\partial P}, \quad \dot{P} = -\partial K / \partial Q$$

heißen <u>kanonische Transformationen</u>.

$$\begin{aligned} q &= (q_1, \dots, q_f) \\ p &= (p_1, \dots, p_f) \\ Q &= (Q_1, \dots, Q_f) \\ P &= (P_1, \dots, P_f). \end{aligned}$$

f : # Freiheitsgrade

Satz: Eine Transformation

$$q, p, \mathcal{H}(q,p,t) \longrightarrow Q, P, K(Q,P,t)$$

ist kanonisch, wenn $Q(q,p,t), P(q,p,t)$

die erzeugende Gleichung

$$\underbrace{p\dot{q} - \mathcal{H}(q,p,t)}_{L_H(q,p,\dot{q},t)} = \underbrace{P\dot{Q} - K(Q,P,t)}_{L_K(Q,P,\dot{Q},t)} + \frac{d}{dt} F(q,p,Q,P,t)$$

mit der erzeugenden Funktion F

erfüllen.

Beweis: Variationsprinzip im Phasenraum Γ

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt\, L_H = 0 \Rightarrow \boxed{\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \; \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}}$$

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt\, L_K = 0 \rightarrow \dot{Q} = \frac{\partial K}{\partial P}, \; \dot{P} = -\frac{\partial K}{\partial Q}$$

P

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt \, \frac{d}{dt} F = 0 \, ,$$ die beiden Variationen

unterscheiden sich nur um ein totales Differential dF.

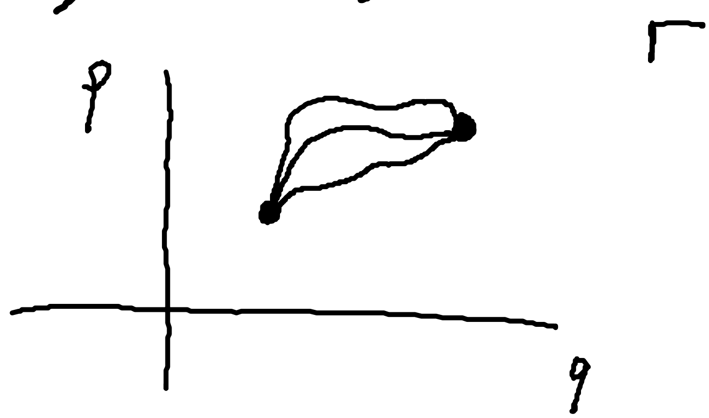
Deshalb gilt

$$\delta \int dt L_H = 0 \Leftrightarrow \delta \int dt L_K = 0 \, .$$

Ausgenutzt wurde, dass

$$\delta q = 0, \ \delta p = 0, \ \delta Q = 0, \ \delta P = 0$$

an den Rändern.



In $$p\dot{q} - H(q,p,t) = P\dot{Q} - K(Q,P,t) + \frac{d}{dt} F(q,p,Q,P,t)$$

$$\left.\begin{aligned} f: \quad & \underline{Q} = Q(q,p,t) \\ f: \quad & \underline{P} = P(q,p,t) \end{aligned}\right\} \quad 2 \cdot f \text{ Transformationsgleichungen}$$

sind in der erzeugenden Funktion F

2f + 1 Variablen unabhängig.

1) Funktion F_1 : Auflösen nach q und Q

Wir lösen $Q = Q(q,p,t)$ nach p auf,

welches wir in $P = P(q,p,t)$ einsetzen

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

$$F = F_1(q, Q, t).$$

Dann lautet die erzeugende Gleichung explizit

$$dF_1 = p\,dq - P\,dQ + (K-H)\,dt$$

$$\|$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial q} dq + \frac{\partial F_1}{\partial Q} dQ + \frac{\partial F_1}{\partial t} dt$$

$$p = \frac{\partial F_1}{\partial q}, \quad P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q}, \quad K = H + \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

$$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i}, \quad P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \qquad i = 1, \dots, f$$

Nochmal differenzieren:

$$\frac{\partial p_i}{\partial Q_j} = \frac{\partial F_1}{\partial Q_j \partial q_i} = \frac{\partial F_1}{\partial q_i \partial Q_j} = -\frac{\partial P_j}{\partial q_i}$$

als Matrix
$$\boxed{\left(\frac{\partial \underline{p}}{\partial \underline{Q}}\right)^T = -\frac{\partial \underline{P}}{\partial \underline{q}}}$$

Beispiel: $F_1(q,Q,t) \equiv q\,Q$

$$\Rightarrow \quad p = \frac{\partial F_1}{\partial q} = Q$$

$$P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} = -q\,, \qquad K = \mathcal{H}$$

$\Rightarrow$ Rolle von Orts- und Impulskoordinaten sind (modulo −-Zeichen) vertauscht.

F_2: Auflösen nach q und P

Definiere F_2 als Legendre-Trafo von F_1 mit $Q \longrightarrow P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q}$

$$F_2(q,P,t) \equiv QP + F_1(q,Q,t)$$

Diese Erzeugende ist enorm wichtig, sie wird als $S(q,P,t) \equiv F_2(q,P,t)$.

$$\underline{dS} = dF_2 = d(F_1 + QP) =$$

$$= dF_1 + d(QP) = \underbrace{p\,dq - \cancel{P\,dQ} + (K-H)\,dt}_{dF_1} \cancel{+\,dQP}$$

$$+\,Q\,dP$$

$$= \underline{p\,dq + Q\,dP + (K-H)\,dt}$$

$$\boxed{\frac{\partial S}{\partial q} = p\,, \quad \frac{\partial S}{\partial \underline{P}} = Q\,, \quad K = H + \frac{\partial S}{\partial t}}$$

<u>Beispiel</u>: $F_2(q,P,t) \equiv f(q,t)\,\underline{P}$

$$\Longrightarrow \quad Q = \frac{\partial S}{\partial \underline{P}} = \frac{\partial F_2}{\partial \underline{P}} = f(q,t)$$

Das ist eine <u>Punkttrafo</u> (nur Ortskoordinaten)

$\Rightarrow$ Punkttrafos sind kanonisch. Gut!

3) F_3: Auflösen nach p, Q

In $F_1(q,Q,t)$: swap $q \leftrightarrow p = \dfrac{\partial F_1}{\partial q}$

$$F_3(p,Q,t) = -pq + F_1(q,Q,t)$$

Legendre.

$$dF_3 = -d(pq) + dF_1$$

$$= -q\,dp - \cancel{p\,dq} + \left(\cancel{p\,dq} - P\,dQ + (K-H)\,dt\right)$$

wir sind die q-Abhängigkeit losgeworden.

$$q = -\frac{\partial F_3}{\partial p}, \quad P = -\frac{\partial F_3}{\partial Q}, \quad K = H + \frac{\partial F_3}{\partial t}$$

Wegen Vertauschbarkeit der Ableitung

$$\left(\frac{\partial q}{\partial Q}\right)^T = \frac{\partial P}{\partial p}$$

(entspricht Maxwell-Relationen in der Thermodyn.)

$p\,dV$.

F_4: Auflösen nach p und P

$$F_1(q, Q, t) \qquad q \leftrightarrow p, \quad Q \leftrightarrow P$$

durch doppelte Legendretrafo

$$F_4(p, P, t) \equiv -pq + PQ + F_1(q, Q, t)$$

$$dF_4 = -\cancel{p\,dq} \underbrace{- q\,dp} + \cancel{P\,dQ} + Q\,dP + \underbrace{dF_1}_{\cancel{p\,dQ} - \cancel{P\,dQ} + (K-H)\,dt}$$

$$\frac{\partial F_4}{\partial P} = Q, \quad \underbrace{\frac{\partial F_4}{\partial p} = -q}, \quad K = H + \frac{\partial F_4}{\partial t}.$$

Das sind die üblichen Fs; F_1, F_2, F_3, F_4.

$\Rightarrow$ Analogie zur Thermodynamik:
Potentiale

F	freie Energie
H	Enthalpie
Ω	großkanonisches Potential
G	Gibbs-Potential

Kanonizität und Symplektische Form

Wir stellen die Bedingungen zusammen, die wir bei $F_1, \dots, F_4$ aufgesammelt hatten.

$$\left(\frac{\partial p}{\partial Q}\right)^T = -\frac{\partial P}{\partial q} \; ; \quad \left(\frac{\partial p}{\partial P}\right)^T = \frac{\partial Q}{\partial q}$$

$$\left(\frac{\partial q}{\partial Q}\right)^T = \frac{\partial P}{\partial p} \; ; \quad \left(\frac{\partial q}{\partial P}\right)^T = -\frac{\partial Q}{\partial p}$$

$2f \times 2f$ Jacobi Matrix $\underline{\underline{T}} \equiv \dfrac{\partial \underline{x}}{\partial \underline{X}} \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial q}{\partial Q} & \frac{\partial q}{\partial P} \\ \frac{\partial p}{\partial Q} & \frac{\partial p}{\partial P} \end{pmatrix}$

$\underline{x} = (q, p)$, $\underline{X} = (Q, P)$

$$T_{ik} = \frac{\partial x_i}{\partial X_k}$$

Satz: Eine Trafo $(q,p) \to (Q,P)$ ist genau dann kanonisch, wenn die Jacobi-Matrix $T = \frac{\partial x}{\partial X}$ symplektisch ist, d.h. wenn gilt

$$T^T I\, T = I\,, \quad I = \begin{pmatrix} 0_f & 1\!\!1_f \\ -1\!\!1_f & 0_f \end{pmatrix}$$

mit $0_f = \begin{pmatrix} 0 & \cdot & 0 \\ 0 & & 0 \end{pmatrix}$, $1\!\!1_f = \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & 1 & \\ 0 & \cdot & 1 \end{pmatrix} \Big\} f \times f$.

Beweis: $T^T I T = I \Rightarrow I T^T I\, T = I \cdot I = -1\!\!1$

$\Rightarrow \quad J\, T^T J = -T^{-1}$ ist zu zeigen.

$$-J T^T J = \begin{pmatrix} 0 & -1\!\!1 \\ 1\!\!1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\partial q/\partial Q)^T & (\partial p/\partial Q)^T \\ (\partial q/\partial P)^T & (\partial p/\partial P)^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1\!\!1 \\ -1\!\!1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} (\partial p/\partial P)^T & -\left(\frac{\partial q}{\partial P}\right)^T \\ -(\partial p/\partial Q)^T & (\partial q/\partial Q)^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial Q/\partial q & \partial Q/\partial p \\ \partial P/\partial q & \partial P/\partial p \end{pmatrix} = T^{-1}$$

Poissonklammer

$$\{f, g\} \equiv \frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial g}{\partial q} - \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial g}{\partial p}$$

$$= -\left(\frac{\partial f}{\partial q}, \frac{\partial f}{\partial p}\right) \begin{pmatrix} 0_f & 1_f \\ -1_f & 0_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial g/\partial q \\ \partial g/\partial p \end{pmatrix}$$

$x = (q, p)$

$$\boxed{= -\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^T J \frac{\partial g}{\partial x}}$$

Satz: Unter kanonischen Trafos $\underline{x} \to \underline{y}$ bleiben die Poisson-Klammern zweier Funktionen invariant, d.h.

$$\{f, g\}_x = \{f, g\}_y .$$

Beweis:

$$\partial g / \partial y_i = \sum_k \frac{\partial g}{\partial x_k} \underbrace{\frac{\partial x_k}{\partial y_i}}_{T_{ki}} = \sum_k \underbrace{T_{ki}}_{T^T_{ik}} \frac{\partial g}{\partial x_k}$$

$$\boxed{\partial g / \partial \underline{y} = T^T \, \partial g / \partial \underline{x}}$$

$$\{f, g\}_y = -\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^T I \underbrace{\frac{\partial g}{\partial y}}_{T^T \partial g/\partial \underline{x}} = -\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^T \underbrace{T I T^T}_{I} \frac{\partial g}{\partial \underline{x}}$$

$$= -\left(\frac{\partial f}{\partial \underline{x}}\right)^T I \left(\frac{\partial g}{\partial \underline{x}}\right) = \{f, g\}_x$$