

14.2 Hamiltonsche Bewegungsgleichungen

- $$H(\{q_j\}, \{p_j\}, t) = \sum_{j=1}^s p_j \dot{q}_j - L(\{q_j\}, \{\dot{q}_j\}, t) \quad (13.30)$$

... Hamilton-Fkt.

→

$$\begin{cases} \dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} \\ \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} \end{cases} \quad (14.4)$$

... Hamiltonsche (kanonische) Bew.gln.

$$\& \left[\frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial t} \right] \quad (14.5)$$

- Energieerhaltung:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} = 0$$

→ $H = T + U$
Gesamtenergie für $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$

- zyklische Koord.

$$\left[\frac{\partial H}{\partial q_j} = 0 \rightarrow p_j = \alpha = \text{konst.} \right] \quad (14.7)$$

14.3 Methode der Poisson-Klammer

- Observable / Meßgröße:

$$A = A(\{q_j\}, \{p_j\}, t) \quad (14.12)$$

bestimmen Zustand des Systems eindeutig!

(i) Observable = „QM-Slang“

(ii) Bsp: H, q_j, p_j Schwerpt./-impuls

a) Zeitentwicklung von A: klar, wenn $\frac{dA}{dt}$ bekannt

$$\frac{dA}{dt} = \sum_j \left(\frac{\partial A}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial A}{\partial p_j} \dot{p}_j \right) + \frac{\partial A}{\partial t}$$

$= \frac{\partial H}{\partial p_j} \quad = -\frac{\partial H}{\partial q_j}$

→
$$\left[\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t} \right] \quad (14.13)$$

mit
$$\left[\{A, H\} = \sum_j \frac{\partial A}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} \right] \quad (14.14)$$

... Poisson-Klammer von A und H

Spezialfälle:

$$\begin{aligned} A = q_k & \xrightarrow{(14.13)/(14.14)} \left. \begin{aligned} \frac{\partial q_k}{\partial q_j} = \delta_{kj}, \quad \frac{\partial q_k}{\partial p_j} = 0 \\ \dot{q}_k = \{q_k, H\} = \frac{\partial H}{\partial p_k} \end{aligned} \right\} \begin{aligned} (14.14) \\ \text{Hamiltonsche} \\ \text{Bew. gl.} \end{aligned} \\ A = p_k & \xrightarrow{(14.13)/(14.14)} \left. \begin{aligned} \frac{\partial p_k}{\partial p_j} = \delta_{kj}, \quad \frac{\partial p_k}{\partial q_j} = 0 \\ \dot{p}_k = \{p_k, H\} = -\frac{\partial H}{\partial q_k} \end{aligned} \right\} \end{aligned}$$

b) formale Eigenschaften: Rechnen!

$$\boxed{\{A, B\} = \sum_j \left(\frac{\partial A}{\partial q_j} \cdot \frac{\partial B}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial B}{\partial q_j} \right)} \quad (14.15)$$

... Poisson-Klammer

(i) Antisymmetrie:

$$\begin{aligned} \boxed{\{A, B\} = -\{B, A\}} & \quad (14.16) \quad \dots \text{nicht kommutativ} \\ \rightarrow \boxed{\{A, A\} = 0} & \quad (14.17) \end{aligned}$$

(ii) Linearität:

$$\boxed{\{c_1 A_1 + c_2 A_2, B\} = c_1 \{A_1, B\} + c_2 \{A_2, B\}} \quad (14.18)$$

(iii) Nullelement:

$$\boxed{\{c, A\} = 0} \quad (14.19)$$

Konstante

(iv) Produktregel:

$$\boxed{\{A, BC\} = \{A, B\}C + B\{A, C\}} \quad (14.20)$$

NB: Beachte Stellung von C bzw B in QM!

(v) Jacobi-Identität:

$$\boxed{\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0} \quad (14.21)$$

zyklisch
durchtauschen

Beweise: (i)-(iv) durch Einsetzen

(v) nicht einfach

c) Beispiele/Rechnen!

$$(i) \{q_k, p_L\} = \sum_j \left(\underbrace{\frac{\partial q_k}{\partial q_j}}_{\delta_{kj}} \underbrace{\frac{\partial p_L}{\partial p_j}}_{\delta_{Lj}} - \underbrace{\frac{\partial q_k}{\partial p_j}}_{=0} \underbrace{\frac{\partial p_L}{\partial q_j}}_{=0} \right)$$

$$\rightarrow \boxed{\{q_k, p_L\} = \delta_{kL}} \quad (14.22)$$

$$(ii) \boxed{\{q_i, q_j\} = 0 = \{p_i, p_j\}} \quad (14.23)$$

d) $\{\dots\}$ ist unabhängig von kanonischen Variablen!

• kanonische Transformation: $Q_k = Q_k(\{q_j\}, \{p_j\}, t)$
 $P_k = P_k(\{q_j\}, \{p_j\}, t)$

• Observable: $A(\{q_j\}, \{p_j\}, t) = \bar{A}(\{Q_j\}, \{P_j\}, t)$
 $B(\dots) = \bar{B}(\dots)$

$\xrightarrow[\text{[s. Noting]}]{\text{o.B.}} \boxed{\{A, B\}_{q,p} = \{\bar{A}, \bar{B}\}_{Q,P} = \{A, B\}} \quad (14.24)$

$\Rightarrow \{ \dots \}$ erlauben Aussagen unabh. von Wahl der kanonischen Variablen

e) Integrale / Konstanten der Bewegung

(i) $\boxed{\{A, H\} = -\frac{\partial A}{\partial t} \xrightarrow{(14.13)} \frac{dA}{dt} = 0 \rightarrow A = \text{konst.}} \quad (14.25)$
 Bsp: Kap. 14.4

$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t}$

(ii) speziell: $\boxed{\{A, H\} = 0 \text{ \& } \frac{\partial A}{\partial t} = 0 \rightarrow A = \text{konst.}} \quad (14.26)$

Bsp: Gesamtenergie $E = H$!

(iii) erzeuge neue Konstanten der Bewegung:

$\begin{cases} \{H, A\} = \frac{\partial A}{\partial t} \\ \{H, B\} = \frac{\partial B}{\partial t} \end{cases} \xrightarrow[\text{für } A, B, H]{\text{Jacobi Identität (14.21)}} \boxed{\{H, \{A, B\}\} = \frac{\partial}{\partial t} \{A, B\}} \quad (14.25)$
 $\xrightarrow{(14.25)} \{A, B\} = \text{konst.} \quad (14.27)$
 Poisson'scher Satz!
 $\underbrace{A = \text{konst.}}_{B = \text{konst.}}$

f) Quantenmechanik

$\{A, B\} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}] = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}] \quad (14.28)$

(i) $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h ... Plancksche Konstante

(ii) $[\dots, \dots]$... Kommutator mit Eigenschaften 14.3b) (i)-(v)

(iii) $\hat{A}, \hat{B} \dots$ Operatoren = Observablen
 (z.B. Matrizen, Differentialoperatoren)

(iv) Fundamental Klammern

$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (14.29)$

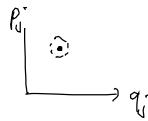
$[\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0 = [\hat{p}_i, \hat{p}_j]$

14.4. Liouville'scher Satz

- Ausblick in die statistische Mechanik
- Zustand eines Systems eindeutig bestimmt durch

$$\underline{X(t)} = \{q_j(t), p_j(t)\}$$

= Punkt im Phasenraum



Problem: $N \stackrel{2K}{=} 1 \text{ Mol} = 6 \cdot 10^{23} \rightarrow$ nur unvollständige Info über System möglich

$\rightarrow$ statistische Mechanik:
trifft Aussagen über Wahrscheinlichkeit & mittlere Größen

• Def:

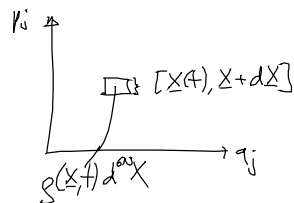
Dichte $g(X, t)$ im Phasenraum:

$$g(X, t) d^{6N} X \quad \dots \text{Wahrscheinlichkeit, System im Zustand aus } [X(t), X+dX] \text{ anzutreffen}$$

$dq_1, \dots, dq_{3N}$
 $dp_1, \dots, dp_{3N}$

$$\int_V g(X, t) d^{6N} X = 1 \quad \dots \text{"System ist irgendwo in V"} = \text{Normierung}$$

(14.31)



- Observable: $A = A(\{q_j\}, \{p_j\}, t) = A(X, t)$

Mittelwert = Erwartungswert

$$\langle A \rangle = \int d^{6N} X \underbrace{g(X, t)}_{\text{Wahrscheinlichkeit, dass } A(X, t) \text{ realisiert wird}} A(X, t)$$

(14.32)

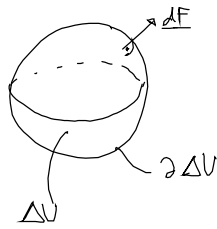
Lösfl:

[Bsp: $1 \frac{1}{6} + 2 \frac{1}{6} + \dots + 6 \frac{1}{6} = 7$]

- Kontinuitätsgleichung: Herleitung

Ausgangspunkt: $\int_{\Delta V} g(X, t) d^{6N} X \quad \dots \text{Wahrscheinlichkeit, System in } \Delta V \text{ anzutreffen}$

Teilvolum des gesamten Phasenraumes



zeitl. Änderung:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Delta V} S(\underline{x}, t) d^3x \stackrel{\Delta V \text{ fest}}{=} \int_{\Delta V} \frac{\partial}{\partial t} S(\underline{x}, t) d^3x$$

$$\stackrel{\substack{\text{System wird} \\ \text{nicht "erzeugt"} \\ \text{oder "vernichtet" }}}{=} - \int_{\partial \Delta V} \underline{j}(\underline{x}, t) \cdot d\vec{F} \quad (19.33)$$

Wahrscheinlichkeit (pro Zeiteinheit),
daß System ΔV über $\partial \Delta V$ verläßt

Wahrscheinlichkeitsstromdichte: (19.34)

$$\underline{j}(\underline{x}, t) = S(\underline{x}, t) \underline{\dot{x}}(t)$$