3.5 Kanonische Transformationen

• Motivation

<u>Lagrange II</u>: Die Lagrange-Funktion $L(\underline{q},\underline{\dot{q}},t)$ hängt von den verallgemeinerten Koordinaten \underline{q} und den verallgemeinerten Geschwindigkeiten $\underline{\dot{q}} = \frac{dq}{dt}$ ab. Die Lagrange-Gleichungen $\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \ i = 1,...,f$

sind invariant gegen f Koordinatentransformationen: Für

$$q_i(t) \to Q_i = Q_i(\underline{q},t) \,, \, \text{mit } L(\underline{q},\underline{\dot{q}},t) \, \to \, \widetilde{L}(\underline{Q},\underline{\dot{Q}},t) \, \, \text{folgt } \, \, \frac{d}{dt} \bigg(\frac{\partial \widetilde{L}}{\partial \dot{Q}_i} \bigg) - \frac{\partial \widetilde{L}}{\partial Q_i} = 0 \,, \, \, i = 1,...,f \,.$$

Sind die partiellen Ableitungen zweiter Ordnung von Q_i nach q_k stetig und det $\left(\frac{\partial^2 Q_i}{\partial q_j \partial q_k}\right) \neq 0$, dann sind die Transformationen umkehrbar eindeutig, also Diffeomorphismen.

<u>Hamilton</u>: Auch die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen $\dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}$, $\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}$ sind invariant unter Koordinatentransformationen $\underline{Q} = \underline{Q}(\underline{q},t)$. Im Hamilton-Formalismus können wir jedoch eine erweiterte Klasse von 2f Transformationen der kanonischen Variablen \underline{q} und \underline{p} betrachten, da \underline{p} und \underline{q} gleichberechtigte, voneinander <u>unabhängige</u> Variablen sind. Diese Erweiterung der Klasse möglicher Transformationen ist ein wesentlicher Vorteil der Hamilton'schen Formulierung der klassischen Mechanik.

<u>Frage</u>: Für welche Transformationen $Q_i = Q_i(\underline{p},\underline{q},t)$, $P_i = P_i(\underline{p},\underline{q},t)$ der kanonischen Variablen p,q folgt aus

$$\dot{p}_{i} = -\frac{\partial H(\underline{p},\underline{q},t)}{\partial q_{i}}, \ \dot{q}_{k} = \frac{\partial H(\underline{p},\underline{q},t)}{\partial p_{k}}, \ \text{ auch } \dot{P}_{i} = -\frac{\partial \widetilde{H}(\underline{P},\underline{Q},t)}{\partial Q_{i}}, \ \dot{Q}_{i} = \frac{\partial \widetilde{H}(\underline{P},\underline{Q},t)}{\partial P_{i}} \ ?$$

Die gesuchten Transformationen überführen kanonische (also den Hamilton'schen Gleichungen genügende) Variable \underline{p} , \underline{q} in neue kanonisch konjugierte Variable \underline{P} , \underline{Q} und heißen deshalb kanonische Transformationen.

• Antwort: Die erzeugende Funktion einer kanonischen Transformation

Die Hamilton´schen Bewegungsgleichungen für \underline{p} , \underline{q} waren Folge des Hamilton´schen Variationsprinzips

$$\delta S[\underline{p},\underline{q}] = \delta \int_{t_i}^{t_2} dt \left[\sum_{i=1}^{f} p_i \dot{q}_i - H(\underline{p},\underline{q},t) \right] = 0, \qquad (H1)$$

vgl. Kap. 3.3. Analog ergeben sich die Gleichungen $\dot{P}_i = -\frac{\partial \widetilde{H}(\underline{P},\underline{Q},t)}{\partial Q_i}, \ \dot{Q}_i = \frac{\partial \widetilde{H}(\underline{P},\underline{Q},t)}{\partial P_i}$ aus der Forderung

$$\delta \widetilde{S}[\underline{P},\underline{Q}] = \delta \int_{t_{i}}^{t_{2}} dt \left[\sum_{i=1}^{f} P_{i} \dot{Q}_{i} - \widetilde{H}(\underline{P},\underline{Q},t) \right] = 0. \tag{H2}$$

Behauptung: (H1) und (H2) sind äquivalent, wenn gilt

$$\sum_{i=1}^f p_i \dot{q}_i - H(\underline{p}, \underline{q}, t) = \sum_{i=1}^f P_i \, \dot{Q}_i - \widetilde{H}(\underline{P}, \underline{Q}, t) + \frac{dF(\underline{q}, \underline{Q}, t)}{dt} \, , \, d.h. \tag{H3}$$

$$dF = \sum_{i=1}^{f} p_i dq_i - \sum_{i=1}^{f} P_i dQ_i + (\widetilde{H} - H) dt.$$
 (H4)

Dabei ist $F(\underline{q},\underline{Q},t)$ eine beliebige Funktion von \underline{q} , \underline{Q} und t. Sie heißt <u>Erzeugende der kanonischen Transformation</u> $Q_i = Q_i(\underline{p},\underline{q},t)$, $P_i = P_i(\underline{p},\underline{q},t)$.

Wegen $dF(\underline{q},\underline{Q},t) = \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial F}{\partial Q_i} dQ_i \right) + \frac{\partial F}{\partial t} dt$ folgt durch Vergleich mit (H3)

$$p_{i} = \frac{\partial F}{\partial q_{i}}, \quad P_{i} = -\frac{\partial F}{\partial Q_{i}}, \quad \widetilde{H} = H + \frac{\partial F}{\partial t}.$$
 (H5)

Diese Behauptung ist richtig, denn

$$0 = \delta S[\underline{p},\underline{q}] = \delta \int\limits_{t_1}^{t_2} \! dt \Bigg[\sum\limits_{i=1}^f \, p_i \dot{q}_i - H(\underline{p},\underline{q},t) \Bigg]^{(\mathrm{H3})} =$$

$$=\int\limits_{t_{1}}^{t_{2}}\!dt\,\sum_{i=1}^{f}\left[\left(\dot{Q}_{i}-\frac{\partial\widetilde{H}}{\partial P_{i}}\right)\delta P_{i}-\left(\dot{P}_{i}+\frac{\partial\widetilde{H}}{\partial Q_{i}}\right)\delta Q_{i}\right]+\sum_{i=1}^{f}\left(P_{i}+\frac{-P_{i}\,(H5)}{\partial Q_{i}}\right)\delta Q_{i}\right]_{t_{1}}^{t_{2}}.$$

Unter Berücksichtigung von (H5) verschwindet der letzte Term auf der rechten Seite. Also müssen die Gleichungen $\dot{P}_i = -\frac{\partial \widetilde{H}}{\partial Q_i}$, $\dot{Q}_i = \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial P_i}$ gelten, um $\delta S[\underline{p},\underline{q}] = 0$ für <u>beliebige</u>,

Wichtig: Die erzeugende Funktion F(q, Q, t) legt die kanonische Transformation eindeutig fest.

A) " $\underline{\text{Hin}}$ "-Transformation $(p,q) \rightarrow (\underline{P},Q)$:

$$p_{i} \overset{\text{(H5)}}{=} \frac{\partial F}{\partial q_{i}} \ \ \text{gibt} \ \ p_{i} = p_{i}(\underline{q},\underline{Q},t) \, , \, \text{nach Inversion also} \quad \underline{Q_{i} = Q_{i}(\underline{p},\underline{q},t)}^{*)}.$$

$$\text{Analog liefert } P_i \overset{(\text{H5})}{=} - \frac{\partial F}{\partial Q_i} \text{ uns } P_i = P_i(\underline{q},\underline{Q},t) \text{ und mit Hilfe von}^*) \ \underline{P_i = P_i(\underline{p},\underline{q},t)} \ .$$

B) "Rück"-Transformation $(\underline{P}, Q) \rightarrow (p, q)$:

Aus
$$P_i^{(H5)} = -\frac{\partial F}{\partial Q_i}$$
 folgt $P_i = P_i(\underline{q},\underline{Q},t)$, die inverse Funktion ist $\underline{q_i = q_i(\underline{P},\underline{Q},t)}$.

Das eingesetzt in
$$p_i \stackrel{\text{(H5)}}{=} \frac{\partial F}{\partial q_i}$$
, also in $p_i = p_i(\underline{q},\underline{Q},t)$, gibt $\underline{P_i = P_i(\underline{P},\underline{Q},t)}$.

10.12.14/7.12.16

Eine zentrale Motivation für kanonische Transformationen ist die "Erzeugung" von zyklischen Variablen, also die "Konstruktion" von Integralen der Bewegung.

$$\underline{Lagrange \ II} \text{: Wenn } q_i \ zyklisch, \ also \ \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \ , \ dann \ ist \ p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ wegen \ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = 0 \ \ ein$$

Integral der Bewegung. Trotzdem muss die entsprechende verallgemeinerte Geschwindigkeit \dot{q}_i weiterhin als Variable in der Lagrange-Funktion "mitgeschleppt" werden; die Zahl der Freiheitsgrade vermindert sich also nicht.

Anders im Hamilton-Formalismus:

Hamilton: Wenn
$$q_i$$
 zyklisch, also $\frac{\partial H}{\partial q_i} = 0$, dann ist $\dot{p}_i = 0$ also $p_i = const =: \alpha_i$. In der

Hamilton-Funktion $H(q_1,...,q_{i-1},q_{i+1},...,q_f,p_1,...,p_{i-1},\alpha_i,p_{i+1},...,p_f)$ treten nun q_i <u>und</u> p_i nicht mehr auf, da p_i durch die Konstante α_i ersetzt werden kann. Die Zahl der Freiheitsgrade reduziert sich von f auf f-1.

Idee: "Löse" die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen, indem über geeignete kanonische Transformationen schrittweise neue zyklische Variable erzeugt werden, bis alle neuen verallgemeinerten Koordinaten Qi zyklisch sind.

Gelänge das, wäre das Bewegungsproblem gelöst, denn wir hätten

$$\widetilde{H} = \widetilde{H}(P_1, P_2, ..., P_f, t) \quad \text{ mit } \quad P_i = const =: \alpha_i \text{ , also } \quad \dot{Q}_i = \frac{\partial H}{\partial P_i} = f(t) \quad und \ damit$$

$$Q_i(t) = \int_{t_0}^t dt' f(t') + \beta_i.$$

Die Konstanten α_i und β_i werden aus den Anfangsbedingungen bestimmt.

Beispiel: Kanonische Transformation im Fall des 1d harmonischen Oszillators mit $H(p,q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}q^2 \text{ unter Verwendung der erzeugenden Funktion } F(q,Q) = \frac{m\omega}{2}q^2ctgQ \ .$

Aus
$$P = -\frac{\partial F}{\partial Q} = -\frac{m\omega}{2}q^2\left(-\frac{1}{\sin^2 Q}\right)$$
 folgt $q(P,Q) = \left(\frac{2}{m\omega}P\right)^{1/2}\sin Q$ (A).

$$Wegen \ p \stackrel{(H5)}{=} \frac{\partial F}{\partial q} \quad ist \ p(P,Q) = m\omega q \ ctgQ \stackrel{(A)}{=} m\omega \bigg(\frac{2}{m\omega}P\bigg)^{1/2} sinQ \ ctgQ = \big(2m\omega P\big)^{1/2} cosQ \ . \ (B)$$

Für die transformierte Hamilton-Funktion ergibt sich aus $\widetilde{H} = H + \frac{\partial F}{\partial t}$ (vgl. (H5)) im

$$\mbox{vorliegenden Fall} \quad \widetilde{H} = H + \frac{\partial F}{\partial t} = \frac{1}{2m} 2\, m\omega P \, cos^2 \, Q + \frac{m\omega^2}{2} \frac{2}{m\omega} P \, sin^2 \, Q = \omega P \, .$$

Damit ist die neue Koordinate Q zyklisch und wir erhalten

$$\dot{P} = -\frac{\partial \widetilde{H}}{\partial Q} = 0 \rightarrow P = const := \alpha \quad und \quad \dot{Q} = \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial P} = \omega \rightarrow Q(t) = \omega t + \beta .$$

Rücktransformation zu q(t) ergibt die erwartete harmonische Schwingung

$$q(t) \stackrel{\text{(A)}}{=} \left(\frac{2}{m\omega}P\right)^{1/2} \sin Q = \sqrt{\frac{2\alpha}{m\omega}} \, \sin(\omega t + \beta) \quad \text{mit der Amplitude} \, \, \sqrt{\frac{2\alpha}{m\omega}} \, \, \, \text{und der Phase} \, \, \beta.$$

Nach (B) ist die Zeitabhängigkeit des Impulses $p(t) = (2m\omega P)^{1/2} \cos Q = \sqrt{2m\omega\alpha} \cos(\omega t + \beta)$.

Bemerkungen:

(i) Die kanonische Transformation $Q_i = Q_i(\underline{p},\underline{q},t)$, $P_i = P_i(\underline{p},\underline{q},t)$ verknüpft die neuen Koordinaten und Impulse sowohl mit \underline{p} als auch mit \underline{q} . Durch diese "Durchmischung" geht der ursprüngliche "Sinn" der Begriffe Koordinate und Impuls u.U. verloren (wir hatten schon in Lagrange-II beobachtet, dass die physikalische Dimension eine verallgemeinerten

Koordinate nicht notwendigerweise m ist). Wählen wir die Erzeugende $F(q,Q) = \sum_{i=1}^{t} q_i Q_i$,

dann ist
$$p_i = \frac{\partial F}{\partial q_i} = Q_i$$
 und $P_i = -\frac{\partial F}{\partial Q_i} = -q_i$:

Aus den "alten" Impulsen werden die "neuen" Koordinaten und aus den "alten" Koordinaten die (negativen) "neuen" Impulse. In diesem extremen Fall vertauscht die kanonische Transformation die kanonischen Impulse und Koordinaten lediglich.

(ii) Die Poisson-Klammern sind invariant unter kanonischen Transformationen:

$$\left\{F,G\right\}_{\underline{p},\underline{q}} = \left\{F,G\right\}_{\underline{P},\underline{Q}}$$
 . (Beweis Übungsblatt)

Dieses Ergebnis unterstreicht noch einmal, dass die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen ihre Form unter kanonischen Transformationen nicht verändern: $\dot{q}_i = \{q_i, H\}, \ \dot{p}_i = \{p_i, H\}$ ist invariant unter KT.

(iii) Die zeitliche Entwicklung von $\underline{p}(t)$ und $\underline{q}(t)$ entlang einer Trajektorie im Phasenraum $\underline{p}(t+\tau) = \underline{p}(t;\underline{p}(t),\underline{q}(t)), \ \underline{q}(t+\tau) = \underline{p}(t;\underline{p}(t),\underline{q}(t)) \text{ kann als kanonische Transformation}$ aufgefasst werden, d.h., die Transformation $\left(\underline{p}(t),\underline{q}(t)\right) \rightarrow \left(\underline{p}(t+\tau),\underline{q}(t+\tau)\right)$ ist kanonisch (L², Bd.1, S. 179).

3.6 Die Hamilton-Jacobi-Gleichung

→ Vollendung der klassischen Punktmechanik.

Idee: Versuche durch eine kanonische Transformation $\underline{p}, \underline{q} \xrightarrow{KT} (\underline{P}, \underline{Q})$ zu erreichen, dass die transformierte Hamilton-Funktion identisch Null ist, also $\widetilde{H}(\underline{P},\underline{Q},t) \equiv 0$ gilt? Dann wäre

$$\dot{P}_{i} = -\frac{\partial \widetilde{H}(\underline{P},\underline{Q},t)}{\partial Q_{i}} = 0 \quad also \quad P_{i} = \alpha_{i} = const \quad und \quad \dot{Q}_{i} = \frac{\partial \widetilde{H}(\underline{P},\underline{Q},t)}{\partial P_{i}} = 0 \quad also \quad Q_{i} = \beta_{i} = const$$

d.h., alle verallgemeinerten Koordinaten wären zyklisch.

Um diese Idee zu verwirklichen, verwenden wir eine Erzeugende $G(\underline{q},\underline{P},t)$ mit den unabhängigen Variablen \underline{q} und \underline{P} . Diese gewinnen wir aus $F(\underline{q},\underline{Q},t)$, indem wir \underline{Q} zugunsten von \underline{P} eliminieren. Wegen $P_i = -\frac{\partial F}{\partial Q_i}$ wird G durch Legendre-Transformation aus F konstruiert

$$G = F - \sum_{i=1}^{f} Q_i \frac{\partial F}{\partial Q_i} = F + \sum_{i=1}^{f} Q_i P_i.$$

Wir finden mit
$$dF = \sum_{i=1}^{f} p_i dq_i - \sum_{i=1}^{f} P_i dQ_i + (\widetilde{H} - H) dt$$
 (vgl. (H4), Kap. 3.5)

$$dG = dF + \sum_{i=1}^{f} (P_i dQ_i + Q_i dP_i) = \sum_{i=1}^{f} (p_i dq_i + Q_i dP_i) + (\widetilde{H} - H) dt$$

also

$$p_i = \frac{\partial G}{\partial q_i}, \ Q_i = \frac{\partial G}{\partial P_i}, \ \widetilde{H} = H + \frac{\partial G}{\partial t}$$
.

Die Forderung $\widetilde{H}(\underline{P},\underline{Q},t) \equiv 0$ führt unter Berücksichtigung von $p_i = \frac{\partial G}{\partial q_i}$ auf eine nichtlineare partielle Differentialgleichung

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

für die Erzeugende $\,G(q,\underline{\alpha},t)\,.\,$ Ist $\,G\,$ berechnet ergeben sich die gesuchten Bahnkurven über

$$Q_{i} = \frac{\partial G(\underline{q},\underline{P},t)}{\partial P_{i}} = Q_{i}(\underline{q},\underline{\underline{P}},t) = const =: \beta_{i} \ , \ denn \ das \ bedeutet \ q_{i}(t) = q_{i}(t;\underline{\alpha},\underline{\beta}) \ .$$

Die verallgemeinerten Impulse $p_i(t) = p_i(t; \underline{\alpha}, \underline{\beta})$ finden wir aus $p_i = \frac{\partial G(\underline{q}, \underline{P}, t)}{\partial q_i} = p_i(\underline{q}, \underline{\alpha}, t)$ wenn wir für q_i die gerade gefundene Relation $q_i(t) = q_i(t; \underline{\alpha}, \beta)$ verwenden.

■ Einfaches Beispiel: Bewegung eines freien Teilchen in x-Richtung

$$G=G(x,P,t),\ H=\frac{p^2}{2m}\ ,\ mit\ p=\frac{\partial G}{\partial x}\quad folgt\ \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial G}{\partial x}\right)^2+\frac{\partial G}{\partial t}=0.$$

$$\text{L\"osung:}\quad G=x\,\alpha-\frac{\alpha^2}{2m}\,t\,,\,\alpha=P=\text{const, damit}\quad \widetilde{H}=H+\frac{\partial G}{\partial t}=\frac{\alpha^2}{2m}-\frac{\alpha^2}{2m}\equiv0.$$

Die "neue Koordinate" ist
$$Q = \frac{\partial G}{\partial p} = x - \frac{\alpha}{m}t = const = \beta =: x_0$$
. Umkehrung gibt

$$x(t) = x_0 + \frac{\alpha}{m}t$$
, also die erwartete geradlinig gleichförmige Bewegung mit konstanter

Geschwindigkeit
$$v=\frac{\alpha}{m}$$
 . Der Impuls p ist konstant, $p=\frac{\partial\,G(x,P,t)}{\partial\,x}=\alpha$.

• <u>Behauptung</u>: Entlang der (<u>noch unbekannten</u>) Bahnkurve stimmt die erzeugende Funktion G mit der Wirkung $S(t) = \int\limits_{t_0}^t dt' \ L(t')$ überein.

Beweis: Wir zeigen $\frac{dG}{dt} = L(t)$ entlang der Bahnkurve

$$\frac{dG(\underline{q},\underline{P},t)}{dt} = \sum_{i=1}^f \left(\underbrace{\frac{\partial G}{\partial q_i}}_{p_i} \dot{q}_i + \underbrace{\frac{\partial G}{\partial P_i}}_{O^{i}} \dot{\underline{p}}_i^i \right) + \underbrace{\underbrace{\frac{\partial G}{\partial t}}_{-H \text{ da $\widetilde{H}=0$}}}_{i=1} = \sum_{i=1}^f p_i \ \dot{q}_i - H = L \ .$$

 $^{1)}$ An dieser Stelle wird $\dot{P}_{i}=-\frac{\partial\widetilde{H}}{\partial Q_{i}}=0$, verwendet, also entlang der Bahnkurve gerechnet.

FAZIT: Entlang der gesuchten Bahnkurve ist $G \equiv S$ und S Lösung von

$$H\left(\underline{q}, \frac{\partial S}{\partial \underline{q}}, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \qquad \rightarrow \quad \textbf{Hamilton - Jacobi - Gleichung}$$

Die Hamilton-Jacobi-Gleichung (HJG) ist eine <u>nichtlineare</u> PDE für eine Funktion von f unabhängigen Variablen q_i . Aus dem <u>vollständigen Integral</u> $S(\underline{q},\underline{\alpha},t)$ mit den f Konstanten α_i lassen sich die gesuchten Bahnkurven des durch die Hamilton-Funktion H charakterisierten physikalischen/mechanischen Systems bestimmen.

Damit ist die HJG äquivalent zu den kanonischen Gleichungen (2f ODE)

$$\dot{p}_{i} = -\frac{\partial H(\underline{p},\underline{q},t)}{\partial q_{i}}, \ \dot{q}_{i} = \frac{\partial H(\underline{p},\underline{q},t)}{\partial p_{i}}.$$

Die Relation $S(t) = \int\limits_{t_0}^t dt' \ L(t')$ hilft nicht bei der Berechnung von G oder S, da L als Funktion der gesuchten Bahnkurve benötigt würde, also $L(t) = L(\underline{q}(t), \underline{\dot{q}}(t), t)$, aber $\underline{q}(t)$ eben nicht bekannt ist.

Ist die Hamilton-Funktion H nicht explizit zeitabhängig, führt der Separationsansatz

$$S(\underline{q},\underline{\alpha},t) = W(\underline{q},\underline{\alpha}) + V(t) \qquad \text{auf} \qquad H\Bigg(\,\underline{q},\frac{\partial W}{\partial \underline{q}}\,\Bigg) = -\frac{dV}{dt} = \text{const} =: E \,.$$

Die linke Seite der Gleichung hängt nur von den q_i , die rechte nur von t ab; beide Seiten müssen also konstant sein. Damit folgt in diesem Fall

$$S(\underline{q},\underline{\alpha},t) = W(\underline{q},\underline{\alpha}) - Et, \qquad H\left(\underline{q},\frac{\partial W}{\partial \underline{q}}\right) = E$$

und die Separationskonstante E ist nichts anderes als die im Fall $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$ zeitlich konstante Energie des mechanischen Systems.