Hamilton-Mechanik

Max Knötig

August 10, 2008

1 Einleitung

Der Ausbau der Klassischen Mechanik geht von den Lagrangegleichungen 2. Art weiter zur Hamilton-Mechanik.

2 Verallgemeinerter Impuls

Ein System kann durch die Lagragegleichungen 2. Art in n Freiheitsgraden beschrieben werden. Diese n DGLs *zweiter* Ordnung lassen sich auf 2n DGLs *erster* Ordnung überführen. Dazu definieren wir die partielle Ableitung der Lagrangegleichung nach den verallgemeinerten Geschwindigkeiten:

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \tag{1}$$

als verallgemeinerter "kanonischer" Impuls und führen diese neue Variable in die Physik ein. Es sei betont, dass die kanonischen Impulse nur bei geschwindigkeits*un*abhängigem Potential mit den kinematischen Impulsen (wie etwa $m\dot{x}$) übereinstimmen.

3 Legendre-Transformation

Die Transformation einer Funktion:

$$(Lf)(x) := x\frac{\partial f}{\partial x} - f(x) \tag{2}$$

Heißt *Legendre-Transformation*.

4 Hamilton-Funktion und kanonische Gleichungen

Ausgangspunkt für weiteres ist nun die Lagrangefunktion $\mathcal{L}$. Die Hamiltonfunktion $\mathcal{H}$ ist nun als die Legendre-Transformation der Lagrangefunktion bezüglich $\dot{q}$ definiert:

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) := \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) \tag{3}$$

$$\Rightarrow \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) := \sum_i \dot{q}_i p_i - \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) \tag{4}$$

Beispiel, freies Teilchen ($U = 0$):

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2\right) = T$$

$$\Rightarrow p_x = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} \Rightarrow \quad \dot{x} = \frac{p_x}{m}; \qquad \dot{y} = \frac{p_y}{m}; \qquad \dot{z} = \frac{p_z}{m}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{i=1}^{3} p_i \dot{q}_i - L \\ &= \frac{1}{m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) - \frac{1}{2}m\left(\left(\frac{p_x}{m}\right)^2 + \left(\frac{p_y}{m}\right)^2 + \left(\frac{p_z}{m}\right)^2\right) \\ &= \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \end{aligned}$$

Oder in kurz:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2$$

$$\mathbf{p} = \nabla_{\dot{\mathbf{x}}}\mathcal{L} = m\dot{\mathbf{x}} \Rightarrow \quad \dot{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{p}}{m}$$

$$\mathcal{H} = \mathbf{p}\dot{\mathbf{q}} - \mathcal{L} = \frac{\mathbf{p}^2}{m} - \frac{1}{2}m\left(\frac{\mathbf{p}}{m}\right)^2 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \tag{5}$$

Ich werde die Schritte noch als "Kochrezept" später aufführen. Hier kann man sich schon einen häufigen Fehler vor Augen führen, die Hamiltonfunktion darf nämlich *keine Geschwindigkeiten* enthalten! Die konjugierten Impulse müssen nach den Geschwindigkeiten explizit aufgelöst werden und diese dann in die Definition der Hamiltonfunktion *und* in die Lagrangefunktion eingesetzt werden.

Wir haben jetzt ein System in einem $\mathbf{p} \times \mathbf{q}$ Raum zu beschreiben. Dieser wird als *Phasenraum* bezeichnet und hat $2n$ Dimensionen, wobei n die Anzahl der Freiheitsgrade ist(vgl. Übung). Die Lagrangefunktion wurde im Ortsraum über die Euler-Lagrange-Gleichungen gelöst, wie schaut nun die Analogie im Phasenraum der Hamiltonmechanik aus? Die Bestimmungsgleichungen für $\mathbf{p}$ und $\mathbf{q}$ erlangen wir, indem wir das totale Differential der Gleichung (4) betrachten:

$$\begin{aligned} d\mathcal{H} &= \sum_i d\left(\dot{q}_i p_i\right) - d\mathcal{L} \\ &= \sum_i \frac{\partial\left(\dot{q}_i p_i\right)}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial\left(\dot{q}_i p_i\right)}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i - d\mathcal{L}\left(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t\right) \\ &= \sum_i \left(\dot{q}_i dp_i + p_i d\dot{q}_i - \underbrace{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i}}_{\dot{p}_i} dq_i - \underbrace{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}}_{p_i} d\dot{q}_i\right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \\ &= \sum_i \left(\dot{q}_i dp_i - \dot{p}_i dq_i\right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \end{aligned} \tag{6}$$

Das totale Differential (H ist eine Funktion von $\mathbf{q}$,$\mathbf{p}$ und t) ist andererseits auch:

$$d\mathcal{H}\left(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t\right) = \sum_i \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} dq_i\right) + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} dt \tag{7}$$

Hieran erkennen wir die überaus wichtigen *kanonischen Gleichungen* durch Koeffizientenvergleich von (6) und (7)

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \tag{8}$$

$$-\dot{p}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \tag{9}$$

$$-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \tag{10}$$

Diese Gleichungen legen die DGLs der Bewegung fest. Zunächst müssen also 2n DGLs erster Ordnung gelöst werden, um darauf die Impulse in die verallgemeinerten Orte einzusetzen, erst dann ist das Problem im Ortsraum gelöst. Die kanonischen Gleichungen sind im übrigen völlig äquivalent zu den Euler-Lagrange-Gleichungen, wir haben diese auch explizit in (6) ausgenutzt, was auch zu erwarten war. Die Variablen **q** und **p** sind hier aufgrund der Symmetrie völlig gleichberechtigt und haben in erweiterten Transformationen der Koordinaten nicht mehr viel mit den ursprünglichen Koordinaten zu tun , können insbesondere der Energie oder anderen physikalischen Observablen entsprechen(vgl. Hamilton-Jacobi-Theorie).

Außerdem ist die Lagrangefunktion die Legendre-Transformation der Hamiltongleichung nach **p**, aus (4) und (8) folgt eine schöne Symmetrie:

$$\mathcal{L} = \sum_i \dot{q}_i p_i - \mathcal{H}$$

$$\mathcal{L} = \sum_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} p_i - \mathcal{H} \tag{11}$$

Nur muss bei der Rücktransformation natürlich der Impuls wieder durch die Geschwindigkeiten ausgedrückt werden(vgl. Übung).

5 Hamiltonfunktion, Energie und Zeitabhängigkeit

Für einige Fälle kann die Hamiltonfunktion eine besonders einfache Gestalt annehmen und wir können uns die umständliche Umrechnerei über die Lagrangefunktion sparen. Für skleronome (nicht explizit von der Zeit abhängige $\Leftrightarrow \frac{\partial r_i(\mathbf{q},t)}{\partial t} = 0$) Zwangsbedingungen und geschwindigkeits*un*abhängiges Potential gilt:

$$\mathcal{H} = T + U = E \tag{12}$$

Die Hamiltonfunktion ist in diesem Fall die Gesamtenergie, ausgedrückt in **q**, **p** und t. Die Berechnung fällt dann im Wesentlichen darauf zurück die kinetische Energie in Impulse auszudrücken, ich greife hier das Beispiel (freies Teilchen) von vorhin erneut auf:

$$\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{x}}; \qquad T = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2$$

$$\mathcal{H} = T(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$$

Die totale Zeitableitung der Hamiltonfunktion ist auch interessant (mit(8),(9) und (10)) :

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t}$$

$$= \sum_i \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t}$$

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \tag{13}$$

Folgerichtig ist die Hamiltonfunktion genau dann eine Erhaltungsgröße , wenn $\mathcal{H}$ und $\mathcal{L}$ nicht explizit von der Zeit abhängen. Das heisst, dass die Energie wenn $\mathcal{H} =$ E gilt, genau dann erhalten ist, wenn $\mathcal{H}$ nicht explizit von der Zeit abhängig ist. Allerdings sind die Identifizierung von $\mathcal{H}$ als Energie und als Erhaltungsgröße zwei unterschiedliche Dinge und hängen *nicht* zusammen (siehe Übungen), oder kurz und knackig:

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = 0 \quad \not\Leftrightarrow \quad \mathcal{H} = E \tag{14}$$

Hier noch eine kleine hilfreiche Tabelle der kinetischen Energie für ein freies Teilchen, abhängig von den Impulsen in verschiedenen Koordinaten:

Kartesiche Koordinaten	$T = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right)$
Zylinderkoordinaten	$T = \frac{1}{2m}\left(p_\rho^2 + \frac{p_\varphi^2}{\rho^2} + p_z^2\right)$
Kugelkoordinaten	$T = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\vartheta^2}{r^2} + \frac{p_\varphi^2}{r^2 sin^2(\vartheta)}\right)$

6 Zyklische Koordinaten und Impulserhaltung

Der Satz über zyklische Koordinaten aus der Lagrange-Mechanik lässt sich nun analog unsere Hamilton-Mechanik übertragen. Wenn $\mathcal{L}$ nicht explizit von q_i abhängig ist, gilt:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}\right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0 \tag{15}$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} = const. = p_i \tag{16}$$

Und der kanonische Impuls ist erhalten und die Koordinate wird ***zyklisch*** genannt. Im Hamiltonformalismus gilt dementsprechend, wenn $\mathcal{H}$ nicht explizit von q_i abhängig ist mit (9):

$$-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = 0 = \dot{p}_i \tag{17}$$

$$p_i = const \tag{18}$$

Auch hier heisst die Koordinate zyklisch. Ohne Beispiel (wieder unser freies Teilchen) gehts nicht ins Gehirn:

$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{q}}^2$	$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$
$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0$	$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = 0$

$$p_x = const. \;\; p_y = const. \;\; p_z = const.$$

Alle drei Impulse sind erhalten und alle drei Koordinaten zyklisch (was zu erwarten war).

7 Poisson-Klammern

Poisson-Klammern erscheinen einigen von euch möglicherweise als nur eine weitere Definition, ja gar überflüssig. Die Hamiltonsche Mechanik geht aber noch über diese kleine Zusammenfassung hinaus. Die Poissonklammern spielen eine wichtige Rolle bei erweiterten Transformationen der Koordinaten und bilden die Grundlage für das sogenannte Heisenbergbild in der Quantenmechanik.

Also: Eine Funktion f(**q**,**p**,t) auf den Phasenraum nennen wir *Observable.* Wollen wir also jene irgendeine Funktion im Laufe der Zeit darstellen, bietet es sich an die totale Zeitableitung zu bilden:

$$\frac{df}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i}\dot{p}_i\right) + \frac{\partial f}{\partial t}$$

Mit den kanonischen Gleichungen kommen wir auf:

$$= \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}\right) + \frac{\partial f}{\partial t} \tag{19}$$

Mit der für zwei Observablen ($\mathcal{H}$ ist eine Observable!) definierten *Poisson-Klammer* wird die Gleichung äußerlich einfacher:

$$\{f,g\}_{q,p} = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i} \right) \tag{20}$$

$$\frac{df}{dt} = \{f,\mathcal{H}\} + \frac{\partial f}{\partial t} \tag{21}$$

Die Indizes werden meist nicht mitgeschrieben, da gewöhnlich klar ist, nach was abgeleitet wird. Die Gleichung (21) verdeutlicht, dass die zeitliche Ableitung einer Observablen von der Hamiltonfunktion gesteuert wird. Erhaltungssätze können wir jetzt durch die Poisson-Klammern ausdrücken. Eine Observable ist genau dann erhalten, wenn:

$$\{f,\mathcal{H}\} + \frac{\partial f}{\partial t} = 0 \tag{22}$$

Wichtige Eigenschaften der Poisson-Klammern sind (f, g, h sind Observablen) :

Antisymmetrie	$\{f,g\} = -\{g,f\}$
Linearität	$\{\lambda f + g, h\} = \lambda\{f,h\} + \{g,h\}$
Produktregel	$\{f,gh\} = \{f,g\}h + g\{f,h\}$
fundamentale Poisson-Klammern	$\{q_i,q_j\} = \{p_i,p_j\} = \{f,f\} = 0 \quad \{q_i,p_j\} = \delta_{ij}$
kanonische Gleichungen	$\dot{q}_i = \{q_i,\mathcal{H}\} \quad \dot{p}_i = \{p_i,\mathcal{H}\}$

In Aufgaben genügt es meist verschiedene der oberen Eigenschaften anzuwenden ohne gar die Klammer explizit ausrechnen zu müssen. Hier ein Beispiel vom eindimensionalen harmoischen Oszillator (vgl. Hausaufgabe 32):

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= T + U \\ &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \end{aligned}$$

Die kanonischen Gleichungen führen auf:

$$\begin{aligned} \dot{x} = \{x,\mathcal{H}\} &= \left\{x, \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2\right\} \\ &= \frac{1}{2m}\{x,p^2\} + \frac{1}{2}k\underbrace{\{x,x^2\}}_{0} \\ &= \frac{1}{2m}\left(\{x,p\}p + p\{x,p\}\right) \\ &= \frac{p}{m} \end{aligned}$$

Und

$$\begin{aligned}
\dot{p} = \{p, \mathcal{H}\} &= \left\{p, \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2\right\} \\
&= \frac{1}{2m}\underbrace{\{p, p^2\}}_{0} + \frac{1}{2}k\,\{p, x^2\} \\
&= \frac{1}{2}k\left(\underbrace{\{p, x\}}_{-1}x + x\underbrace{\{p, x\}}_{-1}\right) \\
&= -kx
\end{aligned}$$

Daraus folgen die Bewegungsgleichung:

$$m\ddot{x} + kx = 0$$

Wie könnte es anders sein, die DGL eines Harmonischen Oszillators.

8 Das "Kochrezept"

Die Hamiltongleichung ist nach folgendem Schema aufzustellen:

- Aufstellen der Lagrangefunktion
- Berechnung der konjugierten Impulse p_i
- Diese Impulsgleichung nach den Geschwindigkeiten $\dot{q}_i$ auflösen
- Die Hamiltonfunktion aufstellen und die $\dot{q}_i$ aus der Funktion mit der Impulsgleichung eliminieren:

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) := \sum_i \dot{q}_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)\, p_i - \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t), t)$$

- In vielen Fällen aber einfach nur:

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) := T(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) + U(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$$

  (Siehe 5. Hamiltonfunktion, Energie und Zeitabhängigkeit)

9 Ausleitung

Fast alle Problemstellungen können in der klassischen Mechanik können durch die Lagrangesche-Mechanik gelöst werden und es erweist sich meist nicht als leichter mehr DGLn anstelle von DGLn höherer Ordnung zu lösen. Die Hamilton-Mechanik ist jedoch als Einstieg in moderne Theorien, darunter Quantenmechanik, Chaostheorie und die Statistische Mechanik sehr wichtig. Die Bedeutung der Poisson-Klammern möchte ich noch kurz demonstrieren.

In der Quantenmechanik entsprechen Observablen nach dem sogenannten *Korrespondenzprinzip* linearen Operatoren mit der Eigenschaft:

$$\hat{A}(f(x))\ Operator;\ f(x), g(x)\ \ Funktion;\ \lambda \in \mathbb{R}$$

$$\hat{A}(f(\lambda x) + g(x)) = \lambda\hat{A}(f(x)) + \hat{A}(g(x))$$

Diese Observablen, die beispielsweise dem Impuls, dem Ort oder der Energie entsprechen, sind als lineare Operatoren mithilfe von Martitzen darstellbar, wie in LinAlg I bewiesen wurde und man nennt ihren Vektorraum den *Hilbert-Raum.* Man definiert für diese den sogenannten *Kommutator:*

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Die Fundamentalklammern des quantenmechanischen Kommutators sind:

$$\begin{aligned} [\hat{q}_i,\hat{p}_j] &= i\hbar\delta_{ij} \\ [\hat{q}_i,\hat{q}_j] &= [\hat{p}_i,\hat{p}_j] = 0 \end{aligned}$$

Wobei der Ort q_i und der Impuls p_i durch ihre Operatoren ersetzt werden müssen. Die Hamiltonfunktion geht ebenfalls in ihren Operator über:

$$\mathcal{H}(\mathbf{q},\mathbf{p},t) \Rightarrow \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{q},\mathbf{p},t)$$

Die Bewegungsgleichung für einen Operator $\hat{A}$ lauten dann:

$$\frac{d}{dt}\hat{A} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A},\hat{\mathcal{H}}\right] + \frac{\partial}{\partial t}\hat{A}$$

Diese Realisierung der Quantenmechanik auf diese Art nennt man *Heisenbergsche Matritzenmechanik.* Es handelt sich analog zur Poissonklammer lediglich um eine andere Realisierung dieser abstrakten Klammer. Folglich gelten dieselben Bewegungsgleichungen in der Quantenmechanik. Ein zweiter Ansatz der Quantenmechanik geht ebenfalls über die Hamilton-Mechanik, genauer die *Schrödingersche Wellenmechanik.*