Ferienkurs *Theoretische Mechanik* 2009

Hamilton-Formulierung der Mechanik

Vorlesungskript für den 13. Februar 2009

Ahmed Omran

Inhaltsverzeichnis

1 Motivation

Dieser neue Zugang zur Mechanik wird nun nichts neues an Physik liefern, und ist bloß ein alternativer Formalismus zur Lösung von mechanischen Problemen. Die Lagrange-Formulierung war in der Lage, die meisten Probleme zu bewältigen, und bedarf somit keiner Erweiterung. Die Hamilton-Mechanik ist aber der Ausgangspunkt für weitere physikalische Theorien, insbesondere in der statistischen Physik und Quantentheorie.

Ein System kann durch die Lagrage-Gleichungen 2. Art in n Freiheitsgraden beschrieben werden. Das Prinzip der Hamilton-Mechanik beruht darauf, diese n DGLs *zweiter* Ordnung auf 2n DGLs *erster* Ordnung zu überführen. Dazu erinnern wir uns an die Definition der kanonischen Impulse:

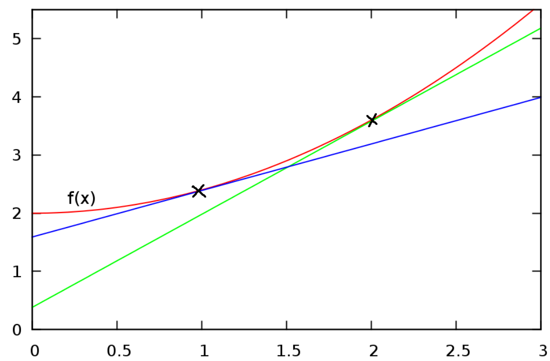
$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \tag{1}$$

und übernehmen diese als neue Variable zur Lösung unserer Probleme. Es sei betont, dass die kanonischen Impulse nur bei geschwindigkeits*un*abhängigem Potential mit den kinematischen Impulsen (wie etwa $m\dot{x}$) übereinstimmen.

2 Legendre-Transformation und Hamilton-Funktion

Die Transformation einer Funktion:

$$L\left[f\right](x) := x\frac{\partial f}{\partial x} - f(x) \tag{2}$$



Heißt *Legendre-Transformation.* Sie ist insbesondere für Variablentransformationen in der Mechanik und Thermodynamik nützlich. Bei der Legendre-Transformation transformiert man lediglich die Variablen einer Funktion, z.B. von zwei Argumenten x, y zu den neuen Argumenten $\frac{\partial f}{\partial x}, y$.
Ausgangspunkt für weiteres ist nun die Lagrange-Funktion $\mathcal{L}$. Die Hamilton-Funktion $\mathcal{H}$ ist nun als die Legendre-Transformierte der Lagrangefunktion bezüglich der Geschwindigkeiten $\dot{q}_i$ definiert:

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

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

Beispiel, freies Teilchen ($V \equiv 0$):

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

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

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

Oder in kurz:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2$$
$$\vec{p} = \nabla_{\dot{\vec{x}}} \mathcal{L} = m\dot{\vec{x}} \Rightarrow \dot{\vec{x}} = \frac{\vec{p}}{m}$$
$$\mathcal{H} = \vec{q} \cdot \vec{p} - \mathcal{L} = \frac{\vec{p}^2}{m} - \frac{1}{2} m \left(\frac{\vec{p}}{m} \right)^2 = \frac{\vec{p}^2}{2m} \tag{5}$$

An dieser Stelle eine wichtige Bemerkung zur Vermeidung eines häufigen Fehlers: **Die Hamiltonfunktion darf 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 $p \times q$ Raum zu beschreiben. Dieser wird als *Phasenraum* bezeichnet. Die Lagrangefunktion wurde im Ortsraum über die Euler-Lagrange-Gleichungen gelöst, wie schaut nun die Analogie im Phasenraum der Hamiltonmechanik aus? Die Bestimmungsgleichungen für p und q erlangen wir, indem wir das totale Differential der Gleichung (4) betrachten:

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

$$\Rightarrow \quad d\mathcal{H} = \sum_i \left(\dot{q}_i dp_i - \dot{p}_i dq_i\right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \tag{6}$$

Das totale Differential (H ist eine Funktion von q,p und t) ist andererseits auch:

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

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

$$\boxed{\begin{aligned} \dot{q}_i &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} && (8) \\ -\dot{p}_i &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} && (9) \\ -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} && (10) \end{aligned}}$$

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 $\mathbf{p}$, aus (4) und (8) folgt nämlich eine schöne Symmetrie:

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

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

Daraus folgt: Die Lagrange-Funktion und die dazugehörige Hamilton-Funktion gehen ineinander durch Legendre-Transformationen über.

Nur muss bei der Rücktransformation natürlich der Impuls wieder durch die Geschwindigkeiten ausgedrückt werden.

3 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) Zwangsbedingungen und ein geschwindigkeits*un*abhängiges Potential gilt:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \sum_i \dot{q}_i p_i - \mathcal{L} \\
&= \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - T + V \\
&= \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - T + V \\
&= \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} - T + V
\end{aligned}$$

Der Term $\sum_i \dot{q}_i \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i}$ ist gleich der doppelten kinetischen Energie. Es gilt nämlich

$$\begin{aligned}
T &= \sum_j \frac{m_j}{2} \dot{r}_j^2 \\
&= \sum_{k,l} \sum_j \frac{m_j}{2} \frac{\partial \dot{r}_j}{\partial q_k} \frac{\partial \dot{r}_j}{\partial q_l} \dot{q}_k \dot{q}_l \\
&= \sum_{k,l} a_{kl} \dot{q}_k \dot{q}_l
\end{aligned}$$

Damit gilt:

$$\begin{aligned}
\sum_i \dot{q}_i \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} &= \sum_i \sum_{k,l} a_{kl} \dot{q}_i \left(\frac{\partial \dot{q}_k}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_l + \frac{\partial \dot{q}_l}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_k \right) \\
&= \sum_i \sum_{k,l} \left(a_{kl} \dot{q}_i \dot{q}_l \delta_{ki} + a_{kl} \dot{q}_i \dot{q}_k \delta_{li} \right) \\
&= \sum_{k,l} a_{kl} \dot{q}_k \dot{q}_l + \sum_{k,l} a_{kl} \dot{q}_l \dot{q}_k = 2T
\end{aligned}$$

Also für holonom-skleronome Zwangsbedingungen und geschwindigkeitsunabhängige Potentiale gilt für die Hamilton-Funktion:

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

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, wie im Beispiel des freien Teilchens von vorher:

$$\vec{p} = m\dot{\vec{x}}; \qquad T = \frac{1}{2}m\dot{\vec{x}}^2$$
$$\mathcal{H} = T(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

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

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

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

Folglich ist die Hamilton-Funktion genau dann eine Erhaltungsgröße , wenn $\mathcal{H}$ und $\mathcal{L}$ nicht explizit von der Zeit abhängen. Das heißt, dass wenn $\mathcal{H} = E$ gilt, die Energie 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:

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

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

4 Zyklische Koordinaten und Impulserhaltung

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

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

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

Der kanonische Impuls bleibt damit 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. Um wieder das Beispiel vom freien Teilchen aufzugreifen:

$$\mathcal{L} = \tfrac{m}{2} \sum_i \dot{x}_i^2 \qquad \Big| \qquad \mathcal{H} = \tfrac{\vec{p}^2}{2m}$$

$$\tfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i} = 0 \qquad \Big| \qquad \tfrac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = 0$$

$$\Rightarrow \quad p_x,\, p_y,\, p_z = const.$$

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

5 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:

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

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, wonach abgeleitet wird. Die Gleichung (21) verdeutlicht, dass die zeitliche Ableitung einer Observablen von der Hamilton-Funktion 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 kann man aus der Definition gewinnen:

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 harmonischen Oszillator:

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

Die kanonischen Gleichungen führen auf:

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

Und

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

Die erste Bewegungsgleichung kann man einmal nach der Zeit differenzieren und in die zweite einsetzen. Damit folgt daraus die Bewegungsgleichung, die man auch für den harmonischen Oszillator erwarten würde.

$$\ddot{x} = \frac{\dot{p}}{m} \quad \Rightarrow \quad m\ddot{x} = -kx$$

6 Das "Kochrezept"

Die Lösung von mechanischen Problemen mit dem Hamilton-Formalismus geht also nach folgendem Schema:

- Aufstellen der Lagrange-Funktion
- 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:

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

(Siehe "Hamiltonfunktion, Energie und Zeitabhängigkeit")