

Kapitel 2

Hamilton Formalismus

2.1 Hamiltonsche Bewegungsgleichungen

Den stationären Zustand eines Systems mit n Freiheitsgraden, also z.B. die aktuellen Positionen der Massenpunkte eines Vielteilchensystems zu einem festen Zeitpunkt, können wir durch n generalisierte Koordinaten q_i beschreiben. Wenn wir die zeitliche Entwicklung etwa mit Hilfe des Lagrange Formalismus berechnen wollen, treten in der Lagrange Funktion neben den Koordinaten auch die zugehörigen Geschwindigkeiten \dot{q}_i auf. Die Lagrange Funktion L hängt also von $2 * n$ Variablen ab, sie ist in einem Raum der Dimension $2n$ definiert, den wir als **Phasenraum** bezeichnen.

Die Lagrangeschen Bewegungsgleichungen führen auf ein System von n gekoppelten Differenzialgleichungen zweiter Ordnung in der Zeit für die Funktionen $q_i(t)$. Zur Bestimmung einer eindeutigen Lösung müssen wir noch $2n$ Randbedingungen vorgeben. Dies geschieht im Allgemeinen dadurch, dass wir für einen Startzeitpunkt t_0 die Werte für die Koordinaten $q_i(t_0)$ und die Geschwindigkeiten $\dot{q}_i(t_0)$ vorgeben. Wir legen also einen Startpunkt in diesem $2n$ dimensionalen Phasenraum fest.

Man kann jetzt versuchen, die Basis des Phasenraumes so zu optimieren, dass die Bewegungsgleichungen besonders einfach werden also z.B. voneinander entkoppeln. Dazu kann man geeignetere generalisierte Koordinaten Q_j , suchen die als Funktionen der q_i gegeben sind. Man spricht in diesem Fall von einer Punkttransformation, da man den aktuellen Zustandspunkt eines Systems durch neue Koordinaten Q_j beschreibt. Durch diese Punkttransformation der generalisierten Koordinaten sind auch die zugehörigen Geschwindigkeiten \dot{Q}_j definiert und wir müssen die Lagrange Funktion als Funktion von Q_j und \dot{Q}_j bestimmen um die Lagrangeschen Bewegungsgleichungen auszuwerten. Die möglichen Transformationen für die Darstellung des $2n$ dimensionalen Phasenraums sind also auf die n generalisierten Koordinaten beschränkt.

Die gekoppelten Bewegungsgleichungen werden natürlich besonders effizient vereinfacht, wenn einzelne Variable der Bewegung als Konstanten der Bewegung einen festen Wert zugewiesen bekommen. Wir haben im Abschnitt ?? über Konstanten der Bewegung gesehen, dass in dem Fall wo die Lagrange Funktion unabhängig von einer der generalisierten Koordinaten ist, der zugehörige kanonische Impuls eine Konstante der Bewegung ist. Ist also z.B. die Koordinate q_α eine zyklische Koordinate - das bedeutet ja gerade, dass L

nicht von q_α abhängt, so gilt für den zugehörigen Impuls

$$p_\alpha = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}, \quad (2.1)$$

dass er eine Konstante der Bewegung ist. Es wäre also hilfreich, wenn wir die Bewegungsgleichungen auf Gleichungen für die generalisierten Impulse transformieren könnten. Dann könnte man sofort die Gleichungen für die Impulse zu zyklischen Koordinaten abkoppeln.

Das Ziel ist es an Stelle der Lagrangefunktion $L(\dot{q}_i, q_i, t)$ eine neue Funktion H zu finden, die auch im $2n$ dimensionalen Phasenraum definiert ist, allerdings von den generalisierten Koordinaten q_i und den zugehörigen Impulsen p_i abhängt: $H(p_i, q_i, t)$. Wir können uns dann in dem Fall, dass p_α eine Konstante der Bewegung ist, sofort auf den Teil des Phasenraumes beschränken, der durch einen konstanten Wert für p_α definiert ist. Dadurch wird die Anzahl der gekoppelten Gleichungen um eine reduziert.

Man erreicht eine solche Transformation, bei der eine Variable q_α durch den zugehörigen Impuls ersetzt wird, durch eine **Legendre Transformation**. Zur allgemeinen Formulierung einer Legendre Transformation nehmen wir eine Funktion $f(x, y)$ an. Man erhält aus dieser Funktion eine neue Funktion, die ausschliesslich von den Variablen

$$x \quad \text{und} \quad \psi := \frac{\partial f}{\partial y}, \quad (2.2)$$

abhängt, in dem man definiert

$$g := \psi y - f(x, y). \quad (2.3)$$

Zum Beweis, dass diese Funktion g nur von x und ψ abhängt, betrachten wir Differenzialformen. Eine Differenzialform df einer Funktion f ist definiert als die Summe über alle Variable von der f abhängt. Jeder Summand enthält die partielle Ableitung dieser Funktion nach der jeweiligen Variablen, multipliziert mit der Differenzialform für die Variable. Es gilt also für die Funktion f , die nur von x und y abhängen soll, dass die Differenzialform df gegeben ist durch

$$df = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy. \quad (2.4)$$

Berechnen wir also z.B. die Differenzialform für die Funktion $h = \psi y$, so ergibt sich

$$\begin{aligned} dh &= \frac{\partial h}{\partial \psi} d\psi + \frac{\partial h}{\partial y} dy \\ &= y d\psi + \psi dy. \end{aligned}$$

Damit berechnen wir

$$\begin{aligned} dg &= d(\psi y) - df \\ &= y d\psi + \psi dy - \frac{\partial f}{\partial x} dx - \underbrace{\frac{\partial f}{\partial y} dy}_{=\psi dy} \\ &= y d\psi - \frac{\partial f}{\partial x} dx. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Aus dieser Gleichung können wir ablesen, dass g nur von den unabhängigen Variablen ψ und x abhängt mit

$$\frac{\partial g}{\partial \psi} = y \quad \text{und} \quad \frac{\partial g}{\partial x} = -\frac{\partial f}{\partial x}.$$

Diese Technik der Legendre Transformation wenden wir nun an, um in der Darstellung des Phasenraumes von den $2n$ Koordinaten q_i und \dot{q}_i auf die generalisierten Koordinaten q_i und p_i zu wechseln. Dazu wenden wir die Legendre Transformation für alle n Freiheitsgrade an und definieren die **Hamilton Funktion** des Systems durch

$$H := \sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i - L(q_i, \dot{q}_i, t), \quad (2.6)$$

mit den generalisierten Impulsen definiert in (2.1). Zum Beweis, dass H nur von den q_i und p_i abhängt, berechnen wir wieder die Differenzialform

$$\begin{aligned} dH &= \sum_{i=1}^n \left(p_i d\dot{q}_i + \dot{q}_i dp_i - \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}}_{=p_i} d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i \right) - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= \sum_{i=1}^n \left(\dot{q}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i \right) - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i \right) + \frac{\partial H}{\partial t} dt. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Aus der zweiten Zeile können wir ablesen, dass die Hamiltonfunktion H lediglich von p_i , q_i und t abhängt, da ja andere Terme nicht in der Darstellung von dH auftauchen. Die dritte Gleichung von (2.7) ist dann die allgemeine Darstellung der Differenzialform von H und so können wir aus dem Vergleich der zweiten mit der dritten Zeile entnehmen, dass

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial p_i} &= \dot{q}_i \\ \frac{\partial H}{\partial q_i} &= -\frac{\partial L}{\partial q_i} = -\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = -\frac{d}{dt} p_i \\ \frac{\partial H}{\partial t} &= -\frac{\partial L}{\partial t} \end{aligned} \quad (2.8)$$

In der zweiten Zeile haben wir die Lagrange Bewegungsgleichung und die Definition des generalisierten Impulses benutzt. Die ersten beiden Zeilen fast man zusammen zu den **Hamiltonschen Bewegungsgleichungen** oder auch **Kanonischen Bewegungsgleichungen** in der Form

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{und} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad \text{für } i = 1 \dots n. \quad (2.9)$$

Dabei handelt es sich also um $2n$ Differenzialgleichungen erster Ordnung in der Zeit. Dies ist direkt vergleichbar mit den n Differenzialgleichungen zweiter Ordnung in der Zeit, die wir im Fall der Lagrange Bewegungsgleichungen zu lösen haben. Wir wissen ja, dass man solche Differenzialgleichungen zweiter Ordnung umschreiben kann in jeweils 2 Differenzialgleichungen erster Ordnung, so dass der Aufwand zur Lösung der Bewegungsgleichung im Fall des Hamilton Formalismus im Allgemeinen vom gleichen Umfang sein wird wie der im Fall des Lagrange Formalismus. Vorteile bietet der Hamilton Formalismus nur in so fern, dass durch die q_i und p_i , wie wir im übernächsten Abschnitt sehen werden, eine flexiblere Darstellung des Phasenraumes ermöglicht wird.

Die Bestimmung der zeitlichen Entwicklung eines Systems mit Hilfe des Hamilton Formalismus lässt sich in die folgenden Schritte gliedern:

- Bestimme die Lagrange Funktion $L(q_i, \dot{q}_i, t)$.
- Diese erlaubt die Definition der generalisierten Impulse

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}.$$

- Damit wird die Hamiltonfunktion definiert durch

$$H(p_i, q_i, t) = \sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i - L.$$

Dabei ist darauf zu achten, dass H als Funktion der p_i und q_i bestimmt wird.

- Dies erlaubt die Aufstellung der Hamiltonschen Bewegungsgleichung (2.9) und man ist aufgefordert dies $2n$ gekoppelten Differenzialgleichungen erster Ordnung zu lösen.
- Die spezielle Lösung dieser Differenzialgleichungen muss dann durch $2n$ Rand- oder Startbedingungen (z.B. die Werte der q_i und p_i zur Startzeit $t = 0$) eindeutig festgelegt werden.

Im verbleibenden Teil dieses Abschnittes sollen die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen direkt aus dem Hamiltonschen Prinzip hergeleitet werden. Das Hamiltonsche Prinzip besagt ja, dass die Natur die Trajektorie von einem gegebenen Startpunkt ($q_i(t_1)$ sind vorgegeben) zu einem gegebenen Endpunkt (auch die q_i zur Endzeit t_2 sind vorgegeben) verfolgt, für die das Wirkungsintegral

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i, t) dt$$

ein Extremum ist. Wenn man also die Lagrange Funktion L gemäß (2.6) umschreibt, ergibt sich das **modifizierte Hamiltonsche Prinzip** durch die Forderung

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i - H(p_i, q_i, t) \right] dt = 0. \quad (2.10)$$

Dabei werden die Wege durch die Angaben der generalisierten Koordinaten und der Impulskoordinaten parameterisiert. Variationen um den "richtigen Weg (q_{i0}, p_{i0}) wollen wir parameterisieren in der Form

$$\begin{aligned} q_{i\alpha}(t) &= q_{i0}(t) + \alpha \eta_i(t) \\ p_{i\alpha}(t) &= p_{i0}(t) + \alpha \epsilon_i(t) \end{aligned} \quad (2.11)$$

wobei die Randbedingungen durch die Forderung

$$\eta_i(t_1) = \eta_i(t_2) = 0 \quad \text{für } i = 1 \dots n, \quad (2.12)$$

vorgegeben sind. Für die Variationen der Impulskoordinaten, dargestellt durch die $\epsilon_i(t)$ gibt es keine weiteren Randbedingungen, da ja durch die $2n$ Bedingungen von (2.12) bereits alle Freiheiten ausgeschöpft sind. Ansonsten sind aber die Orts- und Impulskoordinaten bei diesem modifizierten Hamiltonschen Prinzip vollkommen gleichberechtigte Variable.

Mit der Parameterisierung der Trajektorien aus (2.11) liefert das modifizierte Hamiltonsche Prinzip (2.10)

$$\begin{aligned}
\delta S = 0 &= \frac{\partial}{\partial \alpha} \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_{i=1}^n p_{i\alpha} \dot{q}_{i\alpha} - H(p_{i\alpha}, q_{i,t\alpha}) \right] dt \\
&= \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial p_{i\alpha}}{\partial \alpha} \dot{q}_{i\alpha} + \frac{\partial \dot{q}_{i\alpha}}{\partial \alpha} p_{i\alpha} - \frac{\partial H}{\partial q_{i\alpha}} \frac{\partial q_{i\alpha}}{\partial \alpha} - \frac{\partial H}{\partial p_{i\alpha}} \frac{\partial p_{i\alpha}}{\partial \alpha} \right] dt \\
&= \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^n \left[\epsilon_i \dot{q}_{i\alpha} + \frac{d\eta_i}{dt} p_{i\alpha} - \frac{\partial H}{\partial q_{i\alpha}} \eta_i - \frac{\partial H}{\partial p_{i\alpha}} \epsilon_i \right] dt. \tag{2.13}
\end{aligned}$$

Bei dem Übergang zur letzten Zeile wurde die Parameterisierung (2.11) benutzt um die Ableitungen nach α zu berechnen. Zur weiteren Bearbeitung betrachten wir den 2. Term in dieser Gleichung und formen ihn mit Hilfe der partiellen Integration um in

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{d\eta_i}{dt} p_{i\alpha} dt = \underbrace{\eta_i p_{i\alpha} \Big|_{t_1}^{t_2}}_{=0} - \int_{t_1}^{t_2} \frac{dp_{i\alpha}}{dt} \eta_i dt,$$

(die Null im ersten Term der linken Seite folgt aus (2.12)). Setzt man dieses Ergebnis in (2.13) ein und berücksichtigt, dass die Ableitung nach α an der Stelle $\alpha = 0$ erfolgt, so dass wir die Indices $i\alpha$ in $i0$ umwandeln können, beziehungsweise einfach i schreiben, ergibt sich

$$0 = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^n \left[\epsilon_i \left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) - \eta_i \left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \right] dt. \tag{2.14}$$

Die Funktionen η_i und ϵ_i im Integranden sind beliebige Funktionen der Zeit. Wir können also z.B. alle Funktionen identisch null wählen, es sei lediglich

$$\eta_j(t) = \delta(t - t_0)$$

die Diracsche δ Funktion mit einer beliebigen Zeit t_0 aus dem Intervall $[t_1, t_2]$. Setzt man diese Variationsfunktionen η_i und ϵ_i in (2.14) ein, so ergibt sich für den Zeitpunkt $t = t_0$

$$0 = \dot{p}_j + \frac{\partial H}{\partial q_j}.$$

Entsprechend gilt für Variationsfunktionen, die alle identisch 0 sind bis auf ϵ_j , die wieder einer Funktion $\delta(t - t_0)$ entspricht. Eingesetzt in (2.14) ergibt sich für für den beliebigen Zeitpunkt $t = t_0$

$$0 = \dot{q}_j - \frac{\partial H}{\partial p_j}.$$

Wir haben also so direkt aus dem modifizierten Hamiltonschen Prinzip die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (2.9) hergeleitet.