2.3 Kanonische Transformationen

Ein wichtiger Unterschied zwischen dem Hamilton Formalismus und dem Lagrange Formalismus besteht darin, dass wir verschiedene Arten von Koordinaten benutzen um eine Position des Systems im Phasenraum zu bezeichnen. Im Lagrange Formalismus kennzeichnet man einen Punkt im Phasenraum, also z.B. den Startpunkt eines Systems, durch die Angabe von n generalisierten Koordinaten $q_i(t)$ und den zugehörigen Geschwindigkeiten $\dot{q}_i(t)$. Wenn wir die Beschreibung vereinfachen wollen, also z.B. das System der gekoppelten Bewegungsgleichungen vereinfachen wollen, so kann man versuchen eine geeignetere Basis zu finden. Das bedeutet man versucht andere generalisierte Koordinaten Q_i zu finden, in denen sich die Bewegungsgleichungen vereinfachen. Eine solche Transformation der Koordinaten

$$q_i \quad \Longrightarrow \quad Q_i = Q_i(q_1, \dots q_n)\,, \tag{2.46}$$

legt auch die Transformation der zugehörigen Geschwindigkeiten $\dot{q}_i \Longrightarrow \dot{Q}_i$ fest. Die Freiheit eine geeignete Basis des $2n$ dimensionalen Phasenraumes zu finden ist also auf eine Transformation des n dimensionalen Raumes der Koordinaten beschränkt. Man bezeichnet Transformationen vom Typ (2.46) deshalb als **Punkttransformationen**.

Im Hamilton Formalismus wird der Phasenraum durch n generalisierte Koordinaten und n generalisierte Impulse definiert. Es besteht dabei keine so eindeutige Verknüpfungen zwischen den q_i und p_i, wie das bei den Koordinaten und Geschwindigkeiten des Lagrange Formalismus der Fall. Es erhebt sich deshalb die Frage: Gibt es im Hamilton Formalismus allgemeinere Transformationen als die Punkttransformationen des Lagrange Formalismus? Gibt es Transformationen auf "neue" Koordinaten Q_i und Impulse P_i, die über die Punkttransformationen hinausgehen also vom Typ

$$\begin{array}{c} q_i \\ p_i \end{array} \quad \Longrightarrow \quad \begin{array}{c} Q_i = Q_i(q_1 \dots q_n, p_1 \dots p_n) \\ P_i = P_i(q_1 \dots q_n, p_1 \dots p_n) \end{array}\,, \tag{2.47}$$

sind, aber dennoch zu Hamiltonschen Bewegungsgleichungen führen. Wir nennen eine solche Transformation eine **Kanonische Transformation** wenn die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen sowohl für die ursprüngliche Hamiltonfunktion H mit ihren Satz von Koordinaten und Impulsen

$$H(p_i, q_i, t) \quad \text{mit} \quad \begin{array}{c} \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{array}\,, \tag{2.48}$$

als auch für die "neuen" Koordinaten, Impulse und daraus gebildete Hamiltonfunktion $\mathcal{H}$

$$\mathcal{H}(P_i, Q_i, t) \quad \text{mit} \quad \begin{array}{c} \dot{Q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P_i} \\ \dot{P}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial Q_i} \end{array}\,, \tag{2.49}$$

gelten.

Der Hauptsatz über die Kanonischen Transformationen besagt nun, dass eine Kanonische Transformation genau dann existiert, wenn es für diese Transformation eine **Erzeugende Funktion** $F_1(Q_i, q_i, t)$ gibt in der Art, dass die Transformation (2.47) festgelegt ist durch die Beziehungen

$$P_i \;=\; -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}$$

$$
\begin{aligned}
p_i &= \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \\
\mathcal{H} &= H + \frac{\partial F_1}{\partial t}\,.
\end{aligned}
\tag{2.50}
$$

Bevor wir an den Beweis dieser Behauptung herangehen, sollen diese Begriffe an einem einfachen Beispiel verdeutlicht werden. Dazu betrachten wir die Hamiltonfunktion des harmonischen Oszillators in einer Dimension

$$
H(p,q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}q^2\,,
\tag{2.51}
$$

mit den Bewegungsgleichungen

$$
\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -kq \qquad \text{und} \qquad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}\,.
\tag{2.52}
$$

Die Transformation soll erzeugt werden durch die Funktion

$$
F_1(Q,q) = qQ\,.
$$

Mit (2.50) erhalten wir also die Transformationsgleichungen

$$
P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} = -q \quad \text{sowie} \quad p = \frac{\partial F_1}{\partial q} = Q \quad \text{und} \quad \mathcal{H} = H\,.
\tag{2.53}
$$

Die Koordinaten und Impulse haben bei dieser Transformation also gerade ihre Bedeutung vertauscht. Mit (2.53) ergibt sich die Hamiltonfunktion in den "neuen" Variablen

$$
\mathcal{H} = \frac{Q^2}{2m} + \frac{k}{2}P^2\,,
$$

mit den Bewegungsgleichungen

$$
\dot{P} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial Q} = -\frac{Q}{m} \qquad \text{und} \qquad \dot{Q} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P} = kP\,.
$$

Übersetzt man diese Gleichungen mit den Transformationen (2.53)

$$
\dot{P} = -\dot{q} = -\frac{Q}{m} = -\frac{p}{m} \quad \text{und} \quad \dot{Q} = \dot{p} = kP = -kq\,,
$$

so erhält man zu (2.52) äquivalente Gleichungen. In beiden Koordinatensytemen wird also die gleiche Bewegung beschrieben, wie wir es ja auch von einer kanonischen Transformation erwarten.

Zum Beweis des Hauptsatzes über die Kanonischen Transformationen erinnern wir uns zunächst einmal daran, dass die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen aus dem modifizierten Hamiltonschen Prinzip (**??**) folgten. Die Forderung nach einer Kanonischen Transformation ist also gleichbedeutend damit dass aus

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

folgt, dass

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\sum_{i=1}^{n} P_i \dot{Q}_i - \mathcal{H}(P_i, Q_i, t) \right] = 0$$

folgt und umgekehrt, aus der zweiten Gleichung die erste. Die beiden Integrale sollten sich allenfalls um eine Konstante unterscheiden, die unabhängig com Weg ist. Dies erreicht man genau dann, wenn sich die beiden Integranten nur um die totale Ableitung einer Funktion $F_1(Q_i, q_i, t)$ nach der Zeit unterscheiden, d.h.

$$\sum_{i=1}^{n} p_i \dot{q}_i - H(p_i, q_i, t) = \sum_{i=1}^{n} P_i \dot{Q}_i - \mathcal{H}(P_i, Q_i, t) + \frac{dF_1(Q_i, q_i, t)}{dt} . \qquad (2.54)$$

Der letzte Term integriert über die Zeit liefert ja

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{dF_1(Q_i, q_i, t)}{dt} dt = F_1(Q_i(t_2, q_i(t_2), t_2) - F_1(Q_i(t_1, q_i(t_1), t_1)$$

also eine Zahl die unabhängig ist vom Weg, da ja die Endpunkte $Q_i(t_{1/2})$ bzw. $q_i(t_{1/2})$ bei der Variation des Weges festgehalten werden sollen. Damit entspricht die Forderung nach einer kanonischen Transformation, der Gültigkeit von (2.54). Wir werden uns nun davon überzeugen, dass aus der Gültigkeit von (2.54) die Transformationsregeln (2.50) folgen. Dazu schreiben wir

$$\frac{dF_1(Q_i, q_i, t)}{dt} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \dot{Q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial t} .$$

Setzt man dies in (2.54), ergibt sich nach kleinen Umformungen

$$\sum_{i=1}^{n} \dot{q}_i \left(p_i - \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \right) - H(p_i, q_i, t) = \sum_{i=1}^{n} \dot{Q}_i \left(P_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \right) - \mathcal{H}(P_i, Q_i, t) + \frac{\partial F_1}{\partial t} . \qquad (2.55)$$

Da die alten Koordinaten und die neuen hier als voneinander unabhängig angesehen werden, wird diese Gleichung nur dann identisch erfüllt, wenn

$$\left(p_i - \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \right) = 0 \quad \text{und} \quad \left(P_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \right) = 0 . \qquad (2.56)$$

Es bleibt dann nur noch von (2.55)

$$-H(p_i, q_i, t) = -\mathcal{H}(P_i, Q_i, t) + \frac{\partial F_1}{\partial t} . \qquad (2.57)$$

Die Gleichungen (2.56) und (2.57) entsprechen aber genau den Transformationsgleichungen (2.50). Wir haben also aus der Forderung nach einer Kanonischen Transformation (bzw. aus Gl.(2.54)) die Existenz der erzeugenden Funktion F_1 mit den Eigenschaften (2.50) hergeleitet. Man kann den Weg aber auch umkehren: Aus den Transformationsgleichungen (2.56) und (2.57) folgt (2.55) und damit (2.54) also schliesslich die Behauptung, dass die Transformation kanonisch ist.

Wir haben hier eine erzeugende Funktion F_1 als Funktion von alten und neuen Koordinaten betrachtet. Man mag aber eventuell vorziehen, dass man an Stelle von Q_i und q_i als unabhängige Koordinaten lieber die alten Koordinaten und neuen Impulse als unabhängig betrachten möchte. Dazu generieren wir eine erzeugende Funktion der Form

$$F_2(q_i, P_i, t) = \sum_{i=1}^{n} P_i Q_i + F_1(q_i, Q_i, t)\,. \tag{2.58}$$

Also eine Umformung ähnlich wie bei der Legendre Transformation von L nach H. Wir verifizieren, dass F_2 in der Tat von den unabhängigen Variablen q_i und P_i abhängt und betrachten dazu die Differenzialform

$$dF_2 = \sum_{i=1}^{n} \left[P_i\, dQ_i + Q_i\, dP_i + \underbrace{\frac{\partial F_1}{\partial q_i}}_{=p_i} dq_i + \underbrace{\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}}_{=-P_i} dQ_i \right] + \frac{\partial F_1}{\partial t} dt\,, \tag{2.59}$$

wobei die Beziehungen von (2.50) eingesetzt wurden. Da sich der erste und der vierte Term in der Summe kompensieren, treten nur Terme auf, die proportional zu dP_i, dq_i und dt sind. Dies bedeutet aber, dass F_2 eine Funktion der unabhängigen Variablen P_i, q_i und t ist mit der Differenzialform

$$dF_2 = \sum_{i=1}^{n} \left[\frac{\partial F_2}{\partial P_i} dP_i + \frac{\partial F_2}{\partial q_i} dq_i \right] + \frac{\partial F_2}{\partial t} dt\,, \tag{2.60}$$

ist. Der Vergleich von (2.59) und (2.60) zeigt, dass

$$Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \quad \text{und} \quad p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} \quad \text{sowie} \quad \frac{\partial F_2}{\partial t} = \frac{\partial F_1}{\partial t} = \mathcal{H} - H\,. \tag{2.61}$$

Alternativ kann man auch erzeugende Funktionen $F_3(Q_i, p_i, t)$ und $F_4(P_i, p_i, t)$ betrachten, die (hier ohne Beweis) Koordinatentransformationen der Form

$$P_i = -\frac{\partial F_3}{\partial Q_i} \qquad \text{und} \qquad q_i = -\frac{\partial F_3}{\partial p_i}\,, \tag{2.62}$$

$$Q_i = \frac{\partial F_4}{\partial P_i} \qquad \text{und} \qquad q_i = -\frac{\partial F_4}{\partial p_i}\,, \tag{2.63}$$

erzeugen. Beachte dabei insbesondere das Auftreten der Vorzeichen bei einzelnen dieser Gleichungen.

Wir wollen uns nun davon überzeugen, dass insbesondere die Punkttransformationen (2.46), die ja auch im Rahmen des Lagrange Formalismus möglich sind, einen Spezialfall einer Kanonischen Transformation darstellen. Wir betrachten dazu eine Punkttransformation in der Form, dass die

$$Q_i = f_i(q_j, t)\,, \tag{2.64}$$

also als beliebige Funktionen f_i der q_j gegeben sind. Nehmen wir nun eine erzeugende Funktion vom Typ $F_2(q_i, P_i, t)$ in der Form

$$F_2(q_j, P_j, t) = \sum_i f_i(q_j, t) P_i\,, \tag{2.65}$$

so ergeben die zugehörigen Transformationsgleichungen (2.61)

$$\begin{aligned} Q_i &= \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = f_i(q_j, t) \\ p_i &= \frac{\partial F_2}{\partial q_i} = \sum_j P_j \frac{\partial f_j}{\partial q_i} . \end{aligned} \tag{2.66}$$

Die erste Gleichung liefert gerade die geforderte Punkttransformation. Damit die Transformation kanonisch ist, wird gleichzeitig durch die zweite Gleichung die Transformation der Impulskoordinaten festgelegt.

Als Spezialfall einer Punkttransformation wollen wir uns nun den Fall ansehen, dass die neuen Koordinaten Q_i durch eine orthogonale Transformation aus den q_j bestimmt werden. In diesem Fall ist also

$$Q_i = f_i(q_j) = \sum_j a_{ij} q_j \qquad \text{in Matrixform:} \quad \vec{Q} = A\,\vec{q} \ .$$

Dabei gilt für eine orthoganale Transformation, dass für die Matrix A, die durch die Matrixelemente a_{ij} definiert ist, gilt, $A^{-1} = A^t$, die transponierte Matrix ist auch die inverse zur A. Die Funktion F_2 hat dann die Gestalt

$$F_2 = \sum_{i,j} a_{ij} q_j P_i$$

Damit ergibt sich für die Transformation der Impulse

$$p_i = \sum_j a_{ji} P_j = \sum_j a^t_{ij} P_j \, .$$

In der Matrixschreibweise bedeutet dies:

$$\vec{p} = A^t\,\vec{P} = A^{-1}\,\vec{P} \quad \Longleftrightarrow \quad \vec{P} = A\,\vec{q} \, ,$$

die Impulse unterliegen der gleichen Transformation wie die Koordinaten.

Wir kommen noch einmal auf das Beispiel des Harmonischen Oszillators zurück mit der Hamiltonfunktion in (2.51) und den Bewegungsgleichungen in (2.52). Aus diesen Bewegungsgleichung ergibt sich

$$\ddot{q} = -\omega^2 q \qquad \text{mit} \quad \omega^2 = \frac{k}{m}$$

und daraus die allgemeine Lösung

$$q(t) = A \sin(\omega t + \varphi) \, , \tag{2.67}$$

mit Konstanten A und φ für die Amplitude und Phase, die aus den Anfangsbedingungen zu bestimmen sind. An diesem Beispiel wollen wir demonstrieren, dass man im Prinzip durch die Konstruktion einer geeigneten Kanonischen Transformation, die Bewegungsgleichungen vereinfachen kann. Dies ist vielleicht für das hier gewählte Beispiel nicht wirklich erforderlich, aber das Beispiel soll ja nur dazu dienen, das Prinzip zu demonstrieren.

Wir wählen als erzeugende Funktion, eine Funktion vom Typ F_1 in der Form

$$F_1(Q,q) = \frac{m\omega}{2} q^2 \cot(Q)\,. \tag{2.68}$$

Mit (2.50) definiert diese Funktion die kanonische Transformation

$$\begin{aligned} p &= \frac{\partial F_1}{\partial q} = m\omega q \cot(Q) \\ P &= \frac{\partial F_1}{\partial Q} = \frac{m\omega q^2}{2}\frac{1}{\sin^2 Q}\,. \end{aligned} \tag{2.69}$$

Aus der zweiten dieser Gleichungen ergibt sich

$$q^2 = \frac{2P \sin^2 Q}{m\omega}\,. \tag{2.70}$$

Zusammen mit dem Quadrat der ersten Gleichung erhält man also

$$p^2 = m^2\omega^2 q^2 \cot^2 Q = 2m\omega P \cos^2 Q\,. \tag{2.71}$$

Mit (2.70) und (2.71) haben wir 2 Gleichungen durch die die alten Impulse und Koordinaten durch die neuen P und Q dargestellt sind. Wir können deshalb die Hamiltonfunktion umschreiben

$$\mathcal{H} = H = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2} q^2 = \omega P \cos^2 Q + k\frac{P \sin^2 Q}{m\omega} = \omega P\,. \tag{2.72}$$

Bei der letzten Umformung wurde benutzt, dass $k/m = \omega^2$. Damit haben wir eine sehr einfache Darstellung der Hamiltonfunktion $\mathcal{H} = \omega P$, die auch zu einfachen Bewegungsgleichung führt. Wegen

$$\dot{P} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial Q} = 0$$

ist der Impuls P eine Konstante der Bewegung, nämlich gerade

$$P = \frac{\mathcal{H}}{\omega} = \frac{E}{\omega}$$

also die Energie dividiert durch die Winkelgeschwindigkeit ω. Auch die zweite Bewegungsgleichung ist sehr leicht integriert

$$\dot{Q} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P} = \omega \qquad \Rightarrow \qquad Q(t) = \omega t + \varphi$$

mit einer Konstanten φ, die noch zu bestimmen ist. Eingesetzt in die Gleichung (2.70) ergibt sich daraus für die ursprüngliche Koordinate

$$q(t) = \sqrt{\frac{2P}{m\omega}} \sin(\omega t + \varphi) = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \sin(\omega t + \varphi)\,,$$

also genau das Ergebnis (2.67).

Die Lösung der Differenzialgleichungen aus den Bewegungsgleichungen war in den neuen Variablen P und Q ein Kinderspiel. Das Problem ist aber: Wie findet man eine Kanonische

Tansformation, die die Bewegungsgleichungen so vereinfacht? Wie kommt man auf eine erzeugende Funktion wie (2.68) in diesem Beispiel?

Im Prinzip bietet der **Hamilton Jacobi** Formalismus einen Weg, geeignete erzeugende Funktionen zu bestimmen. Im Fall, dass die Hamiltonfunktion nicht explizit von der Zeit abhängt, wird man versuchen eine erzeugende Funktion zu finden, bei der die Hamiltonfunktion, die ja in diesem Fall eine Konstante der Bewegung ist, genau einem generalisierten Impuls, sagen wir P_1 entspricht, also

$$\mathcal{H} = P_1 \tag{2.73}$$

Damit sind alle Impulse P_i Konstanten und wie man aus den Bewegungsgleichungen sofort sieht ebenso die Koordinten Q_2 bis Q_n. Lediglich für Q_1 erhalten wir

$$Q_1(t) = t + \varphi\,.$$

Die Lösung der Bewegungsgleichungen ist also trivial, wie bestimmen wir aber die erzeugende Funktion F_1? Wir wollen dieses Verfahren am Beispiel des eindimensionalen Harmonischen Oszillators skizzieren. Gesucht ist also eine Funktion $F_1(Q,q)$ mit

$$p = \frac{\partial F_1}{\partial q} \qquad \text{und} \qquad P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q}\,. \tag{2.74}$$

Ausserdem soll aber auch gelten

$$\mathcal{H} = P = H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{kq^2}{2}\,.$$

Setzt man die Beziehungen (2.74) in diese Gleichung ein, so ergibt sich

$$-\frac{\partial F_1}{\partial Q} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial F_1}{\partial q}\right)^2 + \frac{kq^2}{2}\,. \tag{2.75}$$

Dies ist eine partielle Differenzialgleichung für die erzeugende Funktion F_1. Die Lösung dieser Differenzialgleichung wird dadurch erschwert, dass sie nichtlinear ist (die Ableitung def Funktion F_1 nach q tritt quadratisch aus). So führt dieser Hamilton Jacobi Formalismus auch nur in sehr wenigen Beispielen zu Vereinfachungen der Rechnungen.