5.4 Poisson-Klammern, Integrale der Bewegung, Korrespondenzprinzip

Poisson-Klammern ermöglichen, die Theorie formal zu vereinfachen und Bewegungsgleichungen sowie Erhaltungssätze besonders prägnant zu formulieren.

Def.: $\{F,G\} := \sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial G}{\partial q_i}\right) \rightarrow$

Poisson-Klammer der skalaren physikalischen Größen/Observablen $F(\underline{p},\underline{q},t)$ und $G(\underline{p},\underline{q},t)$

Eigenschaften:

(i) antisymmetrisch: $\{F,G\} = -\{G,F\}$, also $\{F,F\} = 0$

(ii) linear: $\{F,\lambda_1 G_1 + \lambda_2 G_2\} = \lambda_1\{F,G_1\} + \lambda_2\{F,G_2\}$, λ_1, λ_2 konstant

(iii) „Produktregel" $\{F,G\cdot H\} = G\{F,H\} + H\{F,G\}$

(iv) „Kettenregel" $\frac{\partial}{\partial t}\{F,G\} = \left\{\frac{\partial F}{\partial t},G\right\} + \left\{F,\frac{\partial G}{\partial t}\right\}$

(v) Jacobi-Identität $\{F,\{G,H\}\} + \{G,\{H,F\}\} + \{H,\{F,G\}\} = 0$ (zyklische Vertauschungen)

■ $$\{q_i,q_j\} = \sum_{k=1}^{f}\left(\frac{\partial q_i}{\partial q_k}\underbrace{\frac{\partial q_j}{\partial p_k}}_{0} - \underbrace{\frac{\partial q_i}{\partial p_k}}_{0}\frac{\partial q_j}{\partial q_k}\right) = 0, \quad \{p_i,p_j\} = 0$$

$$\{q_i,p_j\} = \sum_{k=1}^{f}\left(\frac{\partial q_i}{\partial q_k}\frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \underbrace{\frac{\partial q_i}{\partial p_k}}_{0}\frac{\partial p_j}{\partial q_k}\right) = \sum_{k=1}^{f}(\delta_{ik}\,\delta_{jk} - 0) = \delta_{ij}$$

sind die sogenannten „fundamentalen Poisson-Klammern".

Die totale zeitliche Ableitung einer physikalischen Größe $F(\underline{p},\underline{q},t)$ entlang einer Trajektorie im Phasenraum ist

$$\frac{dF}{dt}=\sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\dot{q}_i+\frac{\partial F}{\partial p_i}\dot{p}_i\right)+\frac{\partial F}{\partial t}=\sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)+\frac{\partial F}{\partial t}\;\rightarrow\;\underline{\frac{dF}{dt}=\{F,H\}+\frac{\partial F}{\partial t}}$$

Wählen wir $F(\underline{p},\underline{q},t)=p_i(t)$, folgt

$$\frac{dp_i}{dt}=\dot{p}_i=\{p_i,H\}=\sum_{i=1}^{f}\left(\underbrace{\frac{\partial p_i}{\partial q_k}}_{0}\frac{\partial H}{\partial p_k}-\underbrace{\frac{\partial p_i}{\partial p_k}}_{\delta_{ik}}\frac{\partial H}{\partial q_k}\right)=-\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

und im Fall $F(\underline{p},\underline{q},t)=q_i(t)$

$$\frac{dq_i}{dt}=\dot{q}_i=\{q_i,H\}=\sum_{i=1}^{f}\left(\underbrace{\frac{\partial q_i}{\partial q_k}}_{\delta_{ik}}\frac{\partial H}{\partial p_k}-\underbrace{\frac{\partial q_i}{\partial p_k}}_{0}\frac{\partial H}{\partial q_k}\right)=\frac{\partial H}{\partial p_i}\,.$$

Fazit: Mit Hilfe der Poisson-Klammern lassen sich die kanonischen Bewegungsgleichungen in der symmetrischen Form

$$\underline{\dot{q}_i=\{q_i,H\}},\;\underline{\dot{p}_i=\{p_i,H\}}$$

schreiben.

- **Poisson´sches Theorem, „Konstruktion“ von Erhaltungsgrößen**

Ist $F(\underline{p},\underline{q},t)$ Integral der Bewegung, gilt

$$\frac{dF}{dt}=0 \text{ also } \frac{\partial F}{\partial t}=-\{F,H\}=\{H,F\}\ .$$

Damit eine nicht explizit von der Zeit abhängige physikalische Größe $F(\underline{p},\underline{q})$ Integral der Bewegung ist, muss ihre Poisson-Klammer mit der Hamilton-Funktion des betrachteten physikalischen Systems verschwinden.

■ In einem physikalischen Systems mit nicht explizit zeitabhängiger Hamilton-Funktion $H=H(\underline{p},\underline{q})$ ist diese eine Erhaltungsgröße $H(\underline{p},\underline{q})=E=\text{const}$, denn $\frac{dH}{dt}=\{H,H\}+0=0$.

Poisson´sches Theorem: Aus $\frac{dF}{dt}=0$ und $\frac{dG}{dt}=0$ folgt $\frac{d}{dt}\{F,G\}=0$.

Beweis: Nach Voraussetzung ist $\frac{\partial F}{\partial t}=\{H,F\}$ und $\frac{\partial G}{\partial t}=-\{G,H\}$. Eingesetzt in die Jacobi-Identität ergibt sich

$$\{F,\{G,H\}\}+\{G,\{H,F\}\}+\{H,\{F,G\}\}=-\left\{F,\frac{\partial G}{\partial t}\right\}-\left\{\frac{\partial F}{\partial t},G\right\}+\{H,\{F,G\}\}=0$$

also

$$\{H,\{F,G\}\}=-\left\{F,\frac{\partial G}{\partial t}\right\}-\left\{\frac{\partial F}{\partial t},G\right\}=-\frac{\partial}{\partial t}\{F,G\} \quad \text{d.h. wie behauptet} \quad \frac{d}{dt}\{F,G\}=0\,.$$

Interpretation: Der Poisson´sche Satz ist nützlich für die Konstruktion neuer Erhaltungsgrößen. Allerdings ergeben sich bei der Anwendung des Satzes mitunter Konstanten oder das „neue“ Bewegungsintegral erweist sich Funktion der „alten“ F und G. Deshalb greift eine Interpretation des Satzes im Sinne von: „Die aus zwei Bewegungsintegralen gebildete Poisson-Klammer ist ebenfalls Integral der Bewegung“ zu kurz.

- **Korrespondenz-Prinzip, Übergang zur Quantenmechanik**

Es fällt die formale Ähnlichkeit zwischen den Relationen $\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$ und den

Vertauschungsrelationen des Orts- und Impulsoperators $[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\ \delta_{ij}$ in der

Quantenmechanik auf.

Ein Vergleich zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik führt zu folgenden Korrespondenzen (↔)

(i) Messbare physikalische Größe

$F(\underline{p}, \underline{q}, t)$	↔	$\hat{F} = F(\underline{\hat{p}}, \underline{\hat{q}}, t)$
(Observable)		hermitescher linearer Operator

(ii) Poisson-Klammer $\{F, G\}$ ↔ $\frac{1}{i\hbar}[\hat{F}, \hat{G}]$ Kommutator

(iii) klassische Bewegungsgleichung im Hamilton-Formalismus	Bewegungsgleichung für Operatoren in/im Heisenberg-Darstellung/Bild der QM

$$\frac{dF}{dt} = \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t} \quad \leftrightarrow \quad \frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{F}, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \quad ,$$

mit der Hamilton-Funktion $H(\underline{p}, \underline{q}, t)$ mit dem Hamilton-Operator $\hat{H} = F(\underline{\hat{p}}, \underline{\hat{q}}, t)$.

5.5 Kanonische Transformationen

- **Motivation**

<u>Lagrange II:</u> $\underline{q}, \underline{\dot{q}}$; $L(\underline{q}, \underline{\dot{q}}, t)$: $\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0,\ i = 1,\dots,f$

Verwendbar sind beliebige verallgemeinerte Koordinaten und die Lagrange-Gleichungen sind invariant gegen f Koordinatentransformationen

$$q_i(t) \ \rightarrow \ Q_i = Q_i(\underline{q}, t),\ \ L(\underline{q}, \underline{\dot{q}}, t) \ \rightarrow \ \tilde{L}(\underline{Q}, \underline{\dot{Q}}, t): \quad \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{Q}_i}\right) - \frac{\partial \tilde{L}}{\partial Q_i} = 0,\ i = 1,\dots,f \ .$$

($\rightarrow$ Punkttransformationen. Es gelte $\det\left(\frac{\partial^2 Q_i}{\partial q_i \partial q_j}\right) \neq 0$. Stetigkeit der partiellen Ableitungen zweiter Ordnung vorausgesetzt, sind diese Transformationen umkehrbar eindeutig, also Diffeomorphismen.)

<u>Hamilton:</u> $\underline{p}, \underline{q}$; $H(\underline{p}, \underline{q}, t) = \sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i p_i - L(\underline{q}, \underline{\dot{q}}, t)$, $\quad p_i := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = p_i(\underline{q}, \underline{\dot{q}}, t) \ \rightarrow \ \dot{q}_i = \dot{q}_i(\underline{q}, \underline{p}, t)$,

$$\dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k},\ \ \dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k} \ .$$

Auch die Hamilton´schen Bewegungsgleichungen sind invariant unter Koordinatentransformationen $\underline{Q} = \underline{Q}(\underline{q}, t)$. Im Hamilton-Formalismus können wir jedoch eine erweiterte Klasse von 2f Transformationen der verallgemeinerten Koordinaten $\underline{q}$ und der verallgemeinerten Impulse $\underline{p}$ betrachten, da $\underline{p}$ und $\underline{q}$ gleichberechtigte unabhängige Variablen sind. Die Erweiterung der Klasse möglicher Transformationen ist einer der wesentlichen Vorteile der Hamilton´schen Formulierung der klassischen Mechanik.

Frage:

Für welche Transformationen $Q_i = Q_i(\underline{p}, \underline{q}, t)$, $P_i = P_i(\underline{p}, \underline{q}, t)$ der kanonischen Variablen $\underline{p}$, $\underline{q}$

d.h. $\dot{p}_i = -\dfrac{\partial H(\underline{p}, \underline{q}, t)}{\partial q_i}$, $\dot{q}_k = \dfrac{\partial H(\underline{p}, \underline{q}, t)}{\partial p_k}$, gilt $\dot{P}_i = -\dfrac{\partial \widetilde{H}(\underline{P}, \underline{Q}, t)}{\partial Q_i}$, $\dot{Q}_i = \dfrac{\partial \widetilde{H}(\underline{P}, \underline{Q}, t)}{\partial P_i}$?

Die gesuchten Transformationen überführen kanonisch konjugierte (den Hamilton´schen Gleichungen genügende) Variable in neue kanonisch konjugierte Variable; sie heißen deshalb kanonische Transformationen. Es handelt sich um diffeomorphe Abbildungen der Phasenraumkoordinaten, die die Hamilton´schen Bewegungsgleichungen forminvariant lassen.

- **Die erzeugende Funktion einer kanonischen Transformation**

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

$$\delta S[\underline{p}, \underline{q}] = \delta \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\sum_{i=1}^{f} p_i \dot{q}_i - H(\underline{p}, \underline{q}, t) \right] = 0 , \qquad \text{(H1)}$$

vgl. Kap. 5.3. Analog ergeben sich die Gleichungen $\dot{P}_i = -\dfrac{\partial \widetilde{H}(\underline{P}, \underline{Q}, t)}{\partial Q_i}$, $\dot{Q}_i = \dfrac{\partial \widetilde{H}(\underline{P}, \underline{Q}, t)}{\partial P_i}$ aus

$$\delta \widetilde{S}[\underline{P}, \underline{Q}] = \delta \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\sum_{i=1}^{f} P_i \dot{Q}_i - \widetilde{H}(\underline{P}, \underline{Q}, t) \right] = 0 . \qquad \text{(H2)}$$

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

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

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

Dabei ist F eine beliebige Funktion von (im vorliegenden Fall) $\underline{q}$ und $\underline{Q}$. Sie heißt **Erzeugende der kanonischen Transformation** $Q_i = Q_i(\underline{p},\underline{q},t)$, $P_i = P_i(\underline{p},\underline{q},t)$. Wegen $F = F(\underline{q},\underline{Q},t)$ haben wir $dF = \sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial F}{\partial q_i}dq_i + \frac{\partial F}{\partial Q_i}dQ_i\right) + \frac{\partial F}{\partial t}dt$; durch Vergleich mit (H3) folgt

$$\underline{p_i = \frac{\partial F}{\partial q_i}\,, \quad P_i = -\frac{\partial F}{\partial Q_i}\,, \quad \widetilde{H} = H + \frac{\partial F}{\partial t}} \qquad \text{(H5)}$$

<u>Beweis</u>: Wir haben behauptet, dass aus (H1-3) $\dot{P}_i = -\frac{\partial \widetilde{H}(\underline{P},\underline{Q},t)}{\partial Q_i}$, $\dot{Q}_i = \frac{\partial \widetilde{H}(\underline{P},\underline{Q},t)}{\partial P_i}$ folgt, d.h., dass die durch $F = F(\underline{q},\underline{Q},t)$ vermittelte Transformation $Q_i = Q_i(\underline{p},\underline{q},t)$, $P_i = P_i(\underline{p},\underline{q},t)$ kanonisch ist. Diese Behauptung ist richtig, denn

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

$$\stackrel{(H3)}{=} \int_{t_1}^{t_2} dt\ \delta\left[\sum_{i=1}^{f} P_i\,\dot{Q}_i - \widetilde{H}(\underline{P},\underline{Q},t)\right] + \delta\Big[F\big(\underline{q}(t_2),\underline{Q}(t_2),t_2\big) - F\big(\underline{q}(t_1),\underline{Q}(t_1),t_1\big)\Big] =$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{i=1}^{f}\left(\delta P_i\,\dot{Q}_i + \underbrace{P_i\,\delta\dot{Q}_i}_{P_i\,\delta Q_i\big|_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} dt\ \dot{P}_i\,\delta Q_i} - \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial Q_i}\delta Q_i - \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial P_i}\delta P_i\right) + \sum_{i=1}^{f}\left(\underbrace{\frac{\partial F}{\partial q_i}\delta q_i\Big|_{t_1}^{t_2}}_{\delta q_i|_{t_1}^{t_2} = 0} + \frac{\partial F}{\partial Q_i}\delta Q_i\Big|_{t_1}^{t_2}\right) =$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{i=1}^{f}\left[\left(\dot{Q}_i - \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial P_i}\right)\delta P_i - \left(\dot{P}_i + \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial Q_i}\right)\delta Q_i\right] + \sum_{i=1}^{f}\left(P_i + \frac{\partial F}{\partial Q_i}\right)\delta Q_i\Big|_{t_1}^{t_2}\ .$$

Der letzte Term verschwindet wegen (H5). 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, unabhängige</u> δQ_i, δP_i erfüllen zu können. Wir erkennen, dass der "Korrekturterm" $\frac{dF(\underline{q},\underline{Q},t)}{dt}$ in (H3) sichert, dass die

Transformation kanonisch ist. Es besteht eine Analogie zu der früher bewiesenen Tatsache, dass $L(\underline{q},\underline{\dot{q}},t)$ und $\widetilde{L}(\underline{q},\underline{\dot{q}},t) = L(\underline{q},\underline{\dot{q}},t) + \frac{dF(\underline{q},t)}{dt}$ zu identischen Lagrange-Gleichungen II. Art führen.

Beachte: Die erzeugende Funktion $F(\underline{q},\underline{Q},t)$ legt die kanonische Transformation eindeutig fest:

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

$p_i = \frac{\partial F}{\partial q_i}$ gibt $p_i = p_i(\underline{q},\underline{Q},t)$, nach Inversion also $\underline{Q_i = Q_i(\underline{p},\underline{q},t)}$ [1)]. Analog liefert

$P_i = -\frac{\partial F}{\partial Q_i}$ uns $P_i = P_i(\underline{q},\underline{Q},t)$ und unter Berücksichtigung von [1)] $\underline{P_i = P_i(\underline{p},\underline{q},t)}$.

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

Aus $P_i = -\frac{\partial F}{\partial Q_i}$ 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 $p_i = \frac{\partial F}{\partial q_i}$, also in $p_i = p_i(\underline{q},\underline{Q},t)$, gibt $\underline{P_i = P_i(\underline{P},\underline{Q},t)}$.

Eine wichtige Motivation für kanonische Transformationen ist die „Erzeugung“ von zyklischen Variablen, also die „Konstruktion“ von Integralen der Bewegung/Erhaltungsgrößen.

Lagrange II: 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 nicht. Anders im Hamilton-Formalismus:

Hamilton: Wenn q_i zyklisch, also $\frac{\partial H}{\partial q_i} = 0$, dann ist $\dot{p}_i = 0$ und $p_i = \text{const} =: \alpha_i$ ebenfalls Integral der Bewegung.
In der Hamilton-Funktion $H(q_1,...,q_{i-1}, q_{i+1},...q_f, p_1,...,p_{i-1}, \alpha, p_{i+1},...,p_f)$ tritt q_i nicht auf und p_i kann durch die Konstante α ersetzt werden. Die Zahl der Freiheitsgrade reduziert sich von f auf f-1.

Idee: „Löse" die Hamilton´schen Bewegungsgleichungen, indem Schritt für Schritt über geeignete kanonische Transformationen zyklische Variable eingeführt werden, bis am Ende alle neuen verallgemeinerten Koordinaten Q_i zyklisch sind. Gelänge das, wäre das Bewegungsproblem gelöst, denn wir hätten

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

und damit

$$Q_i(t) = \int_{t_0}^{t_1} f(t')dt' + ß_i \text{ .}$$

Die Konstanten α_i und β_i werden aus den Anfangsbedingungen bestimmt.

■ Beispiel eindimensionaler harmonischer Oszillator $H(p,q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2$

Wir wählen die erzeugende Funktion $F(q,Q) = \frac{m\omega}{2} q^2 \operatorname{ctg} Q$. Aus

$P \overset{(H5)}{=} -\frac{\partial F}{\partial Q} = -\frac{m\omega}{2} q^2 \left(-\frac{1}{\sin^2 Q} \right)$ folgt $q = \left(\frac{2}{m\omega} P \right)^{1/2} \sin Q$ (A). Über $p \overset{(H5)}{=} \frac{\partial F}{\partial q}$ finden wir

$$p = m\omega q \operatorname{ctg} Q \overset{(A)}{=} m\omega \left(\frac{2}{m\omega} P \right)^{1/2} \sin Q \operatorname{ctg} Q = (2m\omega P)^{1/2} \cos Q \quad (B) \; .$$

Die transformierte Hamilton-Funktion ist (vgl. (H5)) $\widetilde{H} = H + \frac{\partial F}{\partial t}$, d.h. im vorliegenden Fall

$$\widetilde{H} = H + \underbrace{\frac{\partial F}{\partial t}}_{\text{Null}} = \frac{1}{2m} 2m\omega P \cos^2 Q + \frac{m\omega^2}{2} \frac{2}{m\omega} P \sin^2 Q = \omega P = \widetilde{H}(P)$$

Also ist die neue Koordinate Q ist zyklisch und wir haben

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

Daraus ergibt sich die erwartete harmonische Schwingung

$$q(t) \overset{(A)}{=} \left(\frac{2}{m\omega} P \right)^{1/2} \sin Q = \sqrt{\frac{2\alpha}{m\omega}} \sin(\omega t + \beta)$$

mit der Amplitude $\sqrt{\frac{2\alpha}{m\omega}}$ und der Phase β. Aus (B) folgt die Zeitabhängigkeit des Impulses

$$p(t) = (2m\omega P)^{1/2} \cos Q = \sqrt{2m\omega\alpha} \cos(\omega t + \beta) \; .$$