Bemerkungen:

(i) Die KT $Q_i = Q_i(\underline{p},\underline{q},t)$, $P_i = P_i(\underline{p},\underline{q},t)$ verknüpft die neuen Koordinaten und Impulse sowohl mit $\underline{p}$ als auch mit $\underline{q}$. Dadurch kann der ursprüngliche Sinn der Begriffe verallgemeinerte Koordinate und verallgemeinerter Impuls verloren gehen. Den Extremfall stellt eine KT mit der Erzeugenden $F(q,Q) \overset{(H)}{=} \sum_{i=1}^{f} q_i Q_i$ dar: Nach einfacher Rechnung folgt

$p_i = \frac{\partial F}{\partial q_i} \overset{(H)}{=} Q_i$ und $P_i = -\frac{\partial F}{\partial Q_i} \overset{(H)}{=} -q_i$: Aus den "alten" Impulsen werden die "neuen" Koordinaten und aus den "alten" Koordinaten die (negativen) "neuen" Impulse (mit negativem Vorzeichen).

Die betrachtete KT nennt die Variablen lediglich um.

(ii) Die Poisson-Klammern sind invariant unter kanonischen Transformationen:

$$\left\{F,G\right\}_{\underline{p},\underline{q}} = \left\{F,G\right\}_{\underline{P},\underline{Q}} \;.$$

Beweis: Direkte Ausrechnung unter Verwendung der Formeln für KT (L^2, S. 179).

Dieses Ergebnis unterstreicht noch einmal, dass die Hamilton´schen Bewegungsgleichungen ihre Form unter KT nicht ändern,

$\dot{q}_i = \left\{q_i, H\right\},\ \dot{p}_i = \left\{p_i, H\right\}$ invariant unter KT.

(iii) Die Änderung von $\underline{p}(t)$ und $\underline{q}(t)$ entlang einer Trajektorie im Phasenraum kann selbst als KT aufgefasst werden

$$\underline{p}(t+\tau) = \underline{p}(t;\underbrace{\underline{p}(t),\underline{q}(t)}_{\text{"Anfangsbed."}}),\ \ \underline{q}(t+\tau) = \underline{p}(t;\underbrace{\underline{p}(t),\underline{q}(t)}_{\text{"Anfangsbed."}}).$$

Die Transformation $\left(\underline{p}(t),\, \underline{q}(t)\right) \;\to\; \left(\underline{p}(t+\tau),\, \underline{q}(t+\tau)\right)$ ist kanonisch (L^2, S.   )

5.6 Hamilton-Jacobi-Gleichung

$\rightarrow$ Vollendung der klassischen Punktmechanik.

Idee: Kann man durch eine kanonische Transformation $\underline{p},\underline{q} \overset{KT}{\rightarrow} (\underline{P},\underline{Q})$ erreichen, dass die Hamilton-Funktion nach der Transformation identisch Null ist, also $\tilde{H}(\underline{P},\underline{Q},t) \equiv 0$ gilt? Dann wäre

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial \tilde{H}(\underline{P},\underline{Q},t)}{\partial Q_i} = 0 \quad \text{also} \quad P_i = \alpha_i = \text{const} \quad \text{und} \quad \dot{Q}_i = \frac{\partial \tilde{H}(\underline{P},\underline{Q},t)}{\partial P_i} = 0 \quad \text{also} \quad Q_i = \beta_i = \text{const}$$

d.h., alle verallgemeinerten Koordinaten/Variable sind zyklisch.

Um diese Idee zu verwirklichen, verwenden wir eine Erzeugende $G(\underline{q},\underline{P},t)$ der unabhängigen Variablen $\underline{q}$ und $\underline{P}$. Diese gewinnen wir aus $F(\underline{q},\underline{Q},t)$, indem wir $\underline{Q}$ zugunsten von P eliminieren. Wegen $P_i = -\frac{\partial F}{\partial Q_i}$ wird G deshalb durch Legendre-Transformation aus F konstruiert

$$G = F - \sum_{i=1}^{f} Q_i \frac{\partial F}{\partial Q_i} = F + \sum_{i=1}^{f} Q_i P_i \ .$$

Wir finden mit $dF = \sum_{i=1}^{f} p_i dq_i - \sum_{i=1}^{f} P_i dQ_i + (H - \tilde{H})dt$ (vgl. (H4), Kap. 5.5)

$$dG = dF + \sum_{i=1}^{f} (P_i dQ_i + Q_i dP_i) = \sum_{i=1}^{f} (p_i dq_i + Q_i dP_i) + (\tilde{H} - H)dt$$

also

$$p_i = \frac{\partial G}{\partial q_i}, \ Q_i = \frac{\partial G}{\partial P_i}, \ \tilde{H} = H + \frac{\partial G}{\partial t} \ .$$

Die Forderung $\widetilde{H}(\underline{P},\underline{Q},t) \equiv 0$ führt unter Berücksichtigung von $p_i = \dfrac{\partial G}{\partial q_i}$ auf die Gleichung

$$H\left(q, \frac{\partial G}{\partial \underline{q}}, t\right) + \frac{\partial G}{\partial t} = 0$$

für G. Ist G berechnet ergeben sich die gesuchten Bahnkurven über

$$Q_i = \frac{\partial G(\underline{q}, \underline{P}, t)}{\partial P_i} = Q_i(\underline{q}, \overset{\overset{\alpha}{\downarrow}}{\underline{P}}, t) = \beta_i$$, denn das bedeutet $q_i(t) = q_i(t; \underline{\alpha}, \underline{\beta})$.

Die verallgemeinerten Impulse $p_i(t) = p_i(t; \underline{\alpha}, \underline{\beta})$ finden wir aus $p_i = \dfrac{\partial G(\underline{q}, \underline{P}, t)}{\partial q_i} = p_i(\underline{q}, \underline{\alpha}, t)$;

wenn wir für q_i die gerade gefundene Relation $q_i(t) = q_i(t; \underline{\alpha}, \underline{\beta})$ verwenden.

■ Einfaches Beispiel: Bewegung eines freien Teilchen in x-Richtung

$$G = G(x, P, t), \; H = \frac{p^2}{2m}, \; \text{mit } p = \frac{\partial G}{\partial x} \quad \text{folgt} \quad \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial G}{\partial x}\right)^2 + \frac{\partial G}{\partial t} = 0.$$

Lösung: $G = x\alpha - \dfrac{\alpha^2}{2m} t$, $\alpha = P = \text{const}$, damit $\widetilde{H} = H + \dfrac{\partial G}{\partial t} = \dfrac{\alpha^2}{2m} - \dfrac{\alpha^2}{2m} \equiv 0.$

Die "neue Koordinate" ist $Q = \dfrac{\partial G}{\partial p} = x - \dfrac{\alpha}{m} t = \text{const} = \beta =: x_0$. Umkehrung gibt

$x(t) = x_0 + \dfrac{\alpha}{m} t$, also die erwartete geradlinig gleichförmige Bewegung mit konstanter

Geschwindigkeit $v = \dfrac{\alpha}{m}$. Der Impuls p ist konstant, $p = \dfrac{\partial G(x, P, t)}{\partial x} = \alpha$.

Beachte: Die transponierte Koordinate Q ist deshalb konstant, weil die Bewegung praktisch in einem mit dem Teilchen verbundenen Koordinatensystem beschrieben wird.

- <u>Behauptung</u>: Entlang der (noch unbekannten) Bahnkurve stimmt die erzeugende Funktion G mit der Wirkung $S(t) = \int_{t_0}^{t} dt'\, L(t')$ überein.

<u>Beweis</u>: Wir zeigen $\frac{dG}{dt} = L(t)$ <u>entlang der Bahnkurve</u>

$$\frac{dG(\underline{q},\underline{P},t)}{dt} = \sum_{i=1}^{f}\left(\underbrace{\frac{\partial G}{\partial q_i}}_{p_i}\dot{q}_i + \frac{\partial G}{\partial P_i}\underbrace{\dot{P}_i}_{0^{1)}} \right) + \underbrace{\frac{\partial G}{\partial t}}_{-H,\ \text{da}\ \tilde{H}=0} = \sum_{i=1}^{f} p_i\, q_i - H = L\,.$$

FAZIT:

<u>Entlang der gesuchten Bahnkurve</u> ist $\underline{G \equiv S}$ und S Lösung von $\underline{H\left(q, \frac{\partial S}{\partial \underline{q}}, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0}$

$\rightarrow$ **Hamilton-Jacobi-Gleichung**.

Die Hamilton-Jacobi-Gleichung (HJG) ist eine <u>nichtlineare</u> PDE für eine Funktion von f unabhängigen Variablen q_i. Aus dem vollständigen Integral $S(\underline{q},\underline{\alpha},t)$ mit den f Konstanten α_i lassen sich die gesuchten Bahnkurven des durch die Hamilton-Funktion H charakterisierten physikalischen/mechanischen Systems bestimmen.

Damit ist die HJG äquivalent zu den kanonischen Gleichungen (2f ODE)

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H(\underline{p},\underline{q},t)}{\partial q_i},\ \ \dot{q}_i = \frac{\partial H(\underline{p},\underline{q},t)}{\partial p_i}\,.$$

Die Relation $S(t) = \int_{t_0}^{t} dt'\, L(t')$ hilft nicht bei der Berechnung von G oder S, da L als Funktion der gesuchten Bahnkurve benötigt würde, also $L(t) = L(\underline{q}(t), \dot{\underline{q}}(t), t)$, aber $\underline{q}(t)$ eben nicht bekannt ist.

Hängt die Hamilton-Funktion H nicht explizit von der Zeit ab, führt der Separationsansatz

$$S(\underline{q},\underline{\alpha},t) = W(\underline{q},\underline{\alpha}) + V(t) \quad \text{auf} \quad H\left(\underline{q},\frac{\partial W}{\partial \underline{q}}\right) = -\frac{dV}{dt} = \text{const} =: E\,.$$

Die linke Seite der Gleichung hängt nur von den q_i , die rechte nur von t ab; beide Seiten müssen also konstant sein. Damit folgt in diesem Fall

$$S(\underline{q},\underline{\alpha},t) = W(\underline{q},\underline{\alpha}) - E\,t\,, \quad H\left(\underline{q},\frac{\partial W}{\partial \underline{q}}\right) = E$$

und die Separationskonstante E ist nichts Anderes als die im Fall $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$ zeitlich konstante Energie des mechanischen Systems.

- **Rezept zur Berechnung der Bahnkurve aus der Hamilton-Jacobi-Gleichung**
  (am Beispiel ■ des harmonischen Oszillators)

1) Hamilton-Funktion $H(\underline{p},\underline{q},t)$ des betrachteten Systems bestimmen

■ $H(p,q)=\frac{p^2}{2m}+\frac{k}{2}q^2$ q –Auslenkung aus der Ruhelage

2) Hamilton-Jacobi-Gleichung $H\left(q,\frac{\partial S}{\partial \underline{q}},t\right)+\frac{\partial S}{\partial t}=0$ aufstellen

■ $\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2+\frac{k}{2}q^2+\frac{\partial S}{\partial t}=0$

und ihr vollständiges Integral $S(\underline{q},\underline{\alpha},t)$ mit f (→ Anzahl der Freiheitsgrade) unbestimmten Konstanten $\underline{\alpha}=\{\alpha_1,\alpha_2,...,\alpha_f\}$ (→ den „neuen Impulsen $\underline{P}$) bestimmen (z.B. durch Separation der Variablen)

■ Separationsansatz: $S(q,t)=W(q)+V(t)$, $\underbrace{\frac{1}{2m}\left(\frac{dW}{dq}\right)^2+\frac{k}{2}q^2}_{\text{nur q-abhängig}}=\underbrace{-\frac{dV}{dt}}_{\text{nur t-abh.}}=\text{const}=:\alpha\quad(=E)$

also

$V(t)=-\alpha\,t+\text{const}'$ und $\frac{1}{2m}\left(\frac{dW}{dq}\right)^2=\alpha-\frac{k}{2}q^2\geq 0$ d.h. $W(q,\alpha)=\sqrt{2m}\int dq\sqrt{\alpha-kq^2/2}$.

Insgesamt $\underline{S(q,\alpha,t)=\sqrt{2m}\int dq\sqrt{\alpha-kq^2/2}-\alpha\,t}$.

3) Setze $\frac{\partial S(\underline{q},\underline{\alpha},t)}{\partial\alpha_i}=\beta_i$ mit f weiteren unbestimmten Konstanten β_i (→ den „neuen Koordinaten“ $Q_i=\frac{\partial S}{\partial P_i}$) und löse nach q_i auf um $q_i(t;\underline{\alpha},\underline{\beta})$ zu erhalten.

■ Aus $\frac{\partial S}{\partial \alpha} = \beta$ folgt $\beta + t = S(q,\alpha,t) = \sqrt{\frac{m}{k}} \int \frac{dq}{\sqrt{\frac{2\alpha}{k} - q^2}} = \sqrt{\frac{m}{k}} \arcsin\left(\sqrt{\frac{k}{2\alpha}}\, q \right)$,

d.h. wie erwartet die harmonische Schwingung $q(t;\alpha,\beta) = \sqrt{\frac{2\alpha}{k}} \sin[\omega(\beta + t)]$ mit Amplitude

$\sqrt{\frac{2\alpha}{k}}$, Phase $\omega\beta$ und Kreisfrequenz $\omega^2 = \frac{k}{m}$.

4) Berechne $p_i(t;\underline{\alpha},\underline{\beta})$ aus $p_i = \frac{\partial S(\underline{q},\underline{\alpha},t)}{\partial q_i}$ unter Verwendung von $q_i(t;\underline{\alpha},\underline{\beta})$ aus **3)**

■

$$p = \frac{\partial S(q,\alpha,t)}{\partial q} = \frac{\partial W(q,\alpha)}{\partial q} = \sqrt{2m}\sqrt{\alpha - kq^2/2} = \sqrt{2m}\sqrt{\alpha - \frac{k}{2}\frac{2\alpha}{k}\sin^2[\omega(\beta+t)]} = \sqrt{2m\alpha}\,\cos[\omega(\beta+t)]$$

5) Bestimme die $\underline{\alpha}$ und $\underline{\beta}$ aus den Anfangsbedingungen

■ Für $q(t=0) = A$ und $p(t=0) = 0$ ergibt sich beispielsweise

$$0 = p(t=0) = \sqrt{2m\alpha}\,\cos(\omega\beta) \quad \to \quad \omega\beta = \frac{\pi}{2} \pm n\pi$$

$$A = q(t=0) = \sqrt{\frac{2\alpha}{k}}\underbrace{\sin(\omega\beta)}_{1} \quad \to \quad \frac{kA^2}{2} = \alpha = E$$

Dass α die Schwingungsenergie ist, war bereits beim Separationsansatz unter Punkt 2) zu erkennen. Insgesamt haben wir

$$q(t) = A\sin(\omega t + \pi/2) = A\cos\omega t, \qquad p(t) = \sqrt{2m\frac{kA^2}{2}}\cos(\omega t + \pi/2) = -mA\omega\sin\omega t = m\frac{dq}{dt}.$$

- **Korrespondenz zwischen Klassischer Mechanik (KM) und Quantenmechanik (QM) im Lichte der Hamilton-Jacobi-Theorie**

Wir betrachten die Bewegung eines Teilchens in einem Potentialfeld gegeben durch $U(\underline{r},t)$, d.h. es ist $H=\frac{\underline{p}^2}{2m}+U(\underline{r},t)$.

KM: Hamilton-Jacobi-Gleichung (HJG) für die (reelle) Wirkung entlang der Bahnkurve:

$$-\frac{\partial S}{\partial t}=H\left(\underline{r},\underline{\nabla}S,t\right)=\frac{1}{2m}(\underline{\nabla}S)^2+U(\underline{r},t) \quad \to \quad \text{nichtlinear}$$

QM: Schrödinger-Gleichung (SG) für die (komplexe) Wellenfunktion (postuliert)

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\Psi \overset{\text{Korrespondenz-}}{\underset{\text{prinzip}}{=}} H(\hat{\underline{r}},\hat{\underline{p}},t)\Psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2\Psi+U(\underline{r},t)\Psi \quad (\hat{\underline{r}}=\underline{r},\ \hat{\underline{p}}=-i\hbar\underline{\nabla}).$$

Wir versuchen folgenden Ansatz zur Lösung der SG:

$$\psi(\underline{r},t)=e^{\frac{i}{\hbar}S(\underline{r},t)} \text{ mit } S(\underline{r},t)=S_0(\underline{r},t)+i\hbar\,S_1(\underline{r},t)+(i\hbar)^2\,S_2(\underline{r},t)+\ldots$$

Beschränken wir uns auf den ersten und zweiten Term in der Reihenentwicklung nach Potenzen von $i\hbar$ ist $\psi(\underline{r},t)=e^{\frac{i}{\hbar}(S_0+i\hbar\,S_1)}=e^{\frac{i}{\hbar}S_0-S_1}=:a(\underline{r},t)\,e^{\frac{i}{\hbar}S_0(\underline{r},t)}$.

Eingesetzt in die SG finden wir unter Verwendung von

$$\underline{\nabla}\Psi\cong e^{\frac{i}{\hbar}S_0}\left(\underline{\nabla}a+\frac{i}{\hbar}a\,\underline{\nabla}S_0\right)$$

$$\underline{\nabla}^2\Psi\cong e^{\frac{i}{\hbar}S_0}\left[\underline{\nabla}^2a+\frac{2i}{\hbar}\underline{\nabla}a\cdot\underline{\nabla}S_0-\frac{1}{\hbar^2}a\,(\underline{\nabla}S_0)^2+\frac{2i}{\hbar}a\,\underline{\nabla}^2\,S_0\right]$$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}\cong e^{\frac{i}{\hbar}S_0}\left(i\hbar\frac{\partial a}{\partial t}-a\frac{\partial S_0}{\partial t}\right)$$

die Relation

$$a\frac{\partial S_0}{\partial t} - i\hbar\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m}(\underline{\nabla}S_0)^2 - \frac{i\hbar}{2m}a\,\underline{\nabla}^2 S_0 - \frac{i\hbar}{m}\underline{\nabla}a\cdot\underline{\nabla}S_0 - \frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2 a + U\,a = 0\,. \quad \text{(H)}$$

Die Terme der Ordnung $\hbar^0$ sind (für $a \neq 0$)

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\underline{\nabla}S_0)^2 + U = 0$$

d.h. S_0 genügt der HJG: Im Sinne eines Grenzübergangs QM $\rightarrow$ KM bei $\hbar \rightarrow 0$ ist die HJG der klassische Grenzfall der SG.

Die Terme der Ordnung $\hbar^1$ sind $\quad \left.\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{1}{2m}a\,\underline{\nabla}^2 S_0 + \underline{\nabla}a\cdot\underline{\nabla}S_0 = 0\,\right|\,2a$

Nach Multiplikation mit 2a finden wir $\quad \frac{\partial}{\partial t}a^2 + \mathrm{div}\left(a^2\frac{\underline{\nabla}S_0}{m}\right) = 0\,.$

Zur Interpretation dieser Gleichung ist es hilfreich, in der betrachteten Näherung die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(\underline{r},t)|^2$ auszurechnen

$$|\Psi|^2 = \Psi\,\Psi^* = e^{\frac{i}{\hbar}S_0 - S_1}\,e^{-\frac{i}{\hbar}S_0 - S_1} = e^{-2S_1} = a^2\,.$$

Also handelt es sich um die Kontinuitätsgleichung für die quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsdichte. Wir erkennen, dass die durch die Wellenfunktion beschriebene Bewegung i.a. nicht in eine Bewegung entlang einer bestimmten Bahnkurve übergeht. Stattdessen verschiebt sich die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(\underline{r},t)|^2$ im Laufe der Zeit in Übereinstimmung mit den Gesetzen der KM, denn $\frac{\underline{\nabla}S_0}{m} = \frac{\underline{p}}{m}$ ist ja die Geschwindigkeit des klassischen Teilchens.