Hamiltonsche Mechanik

Norbert Dragon

Der Artikel hat zur Zeit noch nicht seine endgültige Form, die jeweils neueste Fassung befindet sich im Internet bei `http://www.itp.uni-hannover.de/~dragon`. Für Hinweise an `dragon@itp.uni-hannover.de` auf Unverständliches oder Falsches, insbesondere auch auf Tippfehler, bin ich dankbar.

Dieser Text wurde mit $\LaTeX\,2_\varepsilon$ und der KOMA-Script-Klasse scrbook, am 16. Dezember 2013 gesetzt.

Überblick

In der Hamiltonschen Formulierung der Mechanik wird deutlich, daß zu jeder kontinuierlichen Symmetrie der Wirkung eine Erhaltungsgröße gehört, und daß umgekehrt jede Erhaltungsgröße eine Symmetrie der Wirkung erzeugt. Die Zeitentwicklung im Phasenraum ist flächentreu.

Inhaltsverzeichnis

1 Phasenraumformulierung

1.1 Legendre-Transformation

Hamiltonsche Mechanik beschreibt die Zeitentwicklung eines mechanischen Systems mit Lagrangefunktion

$$\mathscr{L}: \begin{cases} \mathbb{R}^{2n+1} & \to & \mathbb{R} \\ (t, q, \dot{q}) & \mapsto & \mathscr{L}(t, q, \dot{q}) \end{cases} \tag{1.1}$$

und Bewegungsgleichungen

$$\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial q^i} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}^i} = 0 \ , \quad i = 1, 2 \ldots n \tag{1.2}$$

als Bewegung längs Bahnen $(q(t), p(t))$ im Phasenraum. Dabei steht q für die Koordinaten $q^1, q^2, \ldots, q^n$, wobei n die Zahl der Freiheitsgrade bezeichnet, mit denen die Lage der Teilchen angegeben werden, und p für die kanonisch konjugierten Impulse

$$p_i = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}^i} \ . \tag{1.3}$$

Die Definition der kanonisch konjugierten Impulse p kann zu jeder Zeit t als Abbildung des $2n$-dimensionalen Raumes, der Orte und Geschwindigkeiten mit Koordinaten $(q, \dot{q})$ in den $2n$-dimensionalen Phasenraum $\mathscr{P}$ mit Koordinaten (q, p) gelesen werden. Diese Abbildung braucht nicht invertierbar zu sein. Das Bild des Raums der Orte und Geschwindigkeiten kann eine niedriger dimensionale Untermannigfaltigkeit des Phasenraumes sein, die als Lösung von l Nebenbedingungen

$$\Phi_a(t, q, p) = 0 \, , \quad a = 1, \ldots, l \tag{1.4}$$

angegeben werden kann. Dies tritt bei Systemen mit Differentialgleichungen erster Ordnung auf, zum Beispiel bei der Dirac-Gleichung, und bei Systemen mit Eichsymmetrien. Hamiltonsche Systeme mit Nebenbedingungen sind von Dirac [1] analysiert worden.

Wir wollen uns im folgenden auf den einfachen Fall beschränken, daß die Abbildung von Orten und Geschwindigkeiten auf den Phasenraum zu jeder Zeit t invertierbar ist und die Geschwindigkeiten als Funktionen der Orte und Impulse angegeben werden können,

$$\dot{q}^i = \dot{q}^i(t, q, p) \ . \tag{1.5}$$

Dann ist die Hamiltonfunktion durch

$$\mathscr{H}(t, q, p) = p_j \, \dot{q}^j(t, q, p) - \mathscr{L}(t, q, \dot{q}(t, q, p)) \tag{1.6}$$

definiert. Wenn nichts anderes gesagt ist, verwenden wir die Einsteinsche Summationskonvention und summieren bei doppelt vorkommenden Indizes über ihren Laufbereich.

Die Abbildung, die der Lagrangefunktion $\mathscr{L}(t,q,\dot{q})$ die Hamiltonfunktion $\mathscr{H}(t,q,p)$ zuordnet, wobei $p = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}}$ ist, heißt Legendre-Konjugation.

1.2 Hamiltonsche Bewegungsgleichungen

Die partiellen Ableitungen von $\mathscr{H}$ sind

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p_i} &= \dot{q}^i + p_j \frac{\partial \dot{q}^j}{\partial p_i} - \frac{\partial \dot{q}^j}{\partial p_i}\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}^j} = \dot{q}^i \\ \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial q^i} &= p_j \frac{\partial \dot{q}^j}{\partial q^i} - \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial q^i} - \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}^j}\frac{\partial \dot{q}^j}{\partial q^i} = -\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial q^i} \end{aligned} \tag{1.7}$$

Die Euler-Lagrangeschen Bewegungsgleichungen (1.2) gelten demnach genau dann, wenn die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{q}^i = \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p_i}\ , \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial q^i}\ , \tag{1.8}$$

erfüllt sind. Diese Gleichungen sind ein Differentialgleichungssystem erster Ordnung für die physikalischen Bahnen $(q(t), p(t))$ im Phasenraum. Falls die Hamiltonfunktion nicht explizit von der Zeit abhängt, falls also $\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial t} = 0$ gilt, so schneiden sich die physikalischen Bahnen nicht.

Die physikalischen Bahnen machen die Wirkung

$$W[q,p] = \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t\, \big(p_j \dot{q}^j - \mathscr{H}(t,q,p)\big) \tag{1.9}$$

stationär für alle Variationen δq und δp, die am Rand, also für t_1 und t_2, verschwinden. Entwickelt man nämlich bis zur ersten Ordnung in δq und δp, so erhält man

$$\begin{aligned} \delta W &= W[q+\delta q, p+\delta p] - W[q,p] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t\, \big(\delta p_i\, \dot{q}^i + p_i\, \delta\dot{q}^i - \delta q^i\, \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial q^i} - \delta p_i\, \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p_i}\big) \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t\, \big(\delta p_i\, (\dot{q}^i - \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p_i}) - \delta q^i\, (\dot{p}_i + \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial q^i}) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(p_i\, \delta q^i)\big) \end{aligned} \tag{1.10}$$

Hierbei haben wir $p_i\, \delta\dot{q}^i$ als $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(p_i\, \delta q^i) - \dot{p}_i\, \delta q^i$ geschrieben. Das Integral über $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(p_i\, \delta q^i)$ ergibt $p_i\, \delta q^i(t_2) - p_i\, \delta q^i(t_1)$ und verschwindet, weil die betrachteten Variationen δq^i zu diesen Zeiten verschwinden. Das Integral über die ersten beiden Terme verschwindet für alle δq und δp genau dann, wenn die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (1.8) gelten.

Daß die Hamiltonschen Gleichungen nicht nur hinreichend, sondern auch notwendig dafür sind, daß das Funktional W stationär ist, sieht man aus folgender Überlegung:

wäre für ein i zu einem Zeitpunkt $(\dot{q}^i - \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p_i})$ oder $(\dot{p}_i + \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial q^i})$ größer Null, so wäre dieser Term in einer ganzen Umgebung dieses Zeitpunktes größer Null. Wählt man dann ein δp_i oder δq^i, das außerhalb dieser Umgebung verschwindet und innerhalb dieser Umgebung größer Null ist, so wäre $W[x + \delta x] > W[x]$ und demnach die Wirkung für diese Bahn nicht stationär.

1.3 Poisson-Klammer

Eine Phasenraumfunktion

$$A : \begin{cases} \mathbb{R}^{2n+1} & \to & \mathbb{R} \\ (t, q, p) & \mapsto & A(t, q, p) \end{cases} \tag{1.11}$$

ändert auf einer physikalischen Bahn $(q(t), p(t))$ mit der Zeit ihren Wert gemäß

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} A(t, q(t), p(t)) = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial A}{\partial q^i}\dot{q}^i + \frac{\partial A}{\partial p_i}\dot{p}_i = \frac{\partial A}{\partial q^i}\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial q^i} + \frac{\partial A}{\partial t} \tag{1.12}$$

Insbesondere gilt $\frac{\mathrm{d}\mathscr{H}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial t}$ und daher ändert sich die Energie, der Wert der Hamiltonfunktion, beim Durchlaufen einer physikalischen Bahn nicht, wenn die Hamiltonfunktion nicht explizit von t abhängt.

Definieren wir die Poisson-Klammer zweier Phasenraumfunktionen A und B durch

$$\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial q^i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q^i}\,, \tag{1.13}$$

so schreibt sich die Zeitentwicklung einer Phasenraumfunktion auf einer physikalisch durchlaufenen Bahn als

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = \{A, \mathscr{H}\} + \frac{\partial A}{\partial t}\,. \tag{1.14}$$

Die Poisson-Klammer ist bilinear und antisymmetrisch unter Vertauschung der beiden Argumente.

$$\{A + B, C\} = \{A, C\} + \{B, C\} \tag{1.15}$$

$$\{c\, A, B\} = c\,\{A, B\} \quad \forall c \in \mathbb{R} \tag{1.16}$$

$$\{A, B\} = -\{B, A\} \tag{1.17}$$

Sie erfüllt Produktregeln und die Jacobi-Identität.

$$\{A, B\, C\} = \{A, B\}\, C + B\,\{A, C\} \tag{1.18}$$

$$0 = \{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} \tag{1.19}$$

$$\partial\,\{A, B\} = \{\partial\, A, B\} + \{A, \partial\, B\} \tag{1.20}$$

Hierbei steht die Ableitung ∂ in (1.20) für irgendeine der Ableitungen ∂_t oder ∂_{q^i} oder ∂_{p_i}.

Die fundamentalen Poisson-Klammern

$$\{q^i, q^j\} = 0 = \{p_i, p_j\} \quad \{q^i, p_j\} = \delta^i{}_j \tag{1.21}$$

lassen sich mit der Bezeichnung

$$x^a = \begin{cases} q^a & \text{falls} \quad 1 \leq a \leq n \\ p_{a-n} & \text{falls} \quad n+1 \leq a \leq 2n \end{cases} \tag{1.22}$$

und dem antisymmetrischen Tensor

$$I^{ab} = -I^{ba} = \delta^a{}_{b-n} - \delta^a{}_{b+n} \tag{1.23}$$

kompakt als

$$\{x^a, x^b\} = I^{ab} \tag{1.24}$$

schreiben. Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen haben mit der abkürzenden Notation $\partial_a = \partial_{x^a}$ die Form

$$\dot{x}^a = I^{ab}\,\partial_b \mathscr{H} \ . \tag{1.25}$$

Mit dieser Notation schreibt sich die Poissonklammer als

$$\{A, B\} = I^{ab}\,\partial_a A\,\partial_b B \tag{1.26}$$

und die Mehrfachklammer als

$$\begin{aligned} \{A, \{B, C\}\} &= I^{ab}\,I^{cd}\,\partial_a A\,\partial_b(\partial_c B\,\partial_d C) \\ &= -(I^{ba}\,\partial_a A)\,(I^{cd}\,\partial_d C)\,\partial_b\partial_c B + (I^{ba}\,\partial_a A)\,(I^{cd}\,\partial_d B)\,\partial_b\partial_c C \ . \end{aligned} \tag{1.27}$$

Die Jacobi-Identität (1.19) folgt nun, weil die Summe (1.19) über die zyklischen Vertauschungen von A, B und C wegen der Antisymmetrie (1.17) total antisymmetrisch unter jeder Paarvertauschung ist. Es ist aber der erste Term der zweiten Zeile von (1.27) symmetrisch unter Vertauschung von A und C und der zweite Term symmetrisch unter Vertauschung von A und B, also verschwindet der in A, B und C total antisymmetrische Teil der Mehrfachklammer und die Jacobi-Identität ist gezeigt.

1.4 Erhaltungsgrößen

Eine Erhaltungsgröße ist eine Phasenraumfunktion

$$\phi : \begin{cases} \mathbb{R}^{2n+1} & \to \quad \mathbb{R} \\ (t, q, p) & \mapsto \quad \phi(t, q, p) \end{cases} \ , \tag{1.28}$$

die ihren Wert nicht ändert, wenn $(t, q(t), p(t))$ die physikalische Bahn durchlaufen,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\phi = \{\phi, \mathscr{H}\} + \partial_t \phi = 0 \ . \tag{1.29}$$

Wenn ϕ_1 und ϕ_2 Erhaltungsgrößen sind, dann sind natürlich Vielfache und Summen Erhaltungsgrößen. Sie bilden also einen Vektorraum. Offensichtlich sind auch Produkte und allgemeiner Funktionen $f(\phi_1, \ldots, \phi_l)$ von Erhaltungsgrößen wieder Erhaltungsgrößen, allerdings sind diese neuen Erhaltungsgrößen abhängig und liefern keine zusätzliche

Information. Es ist aber darüber hinaus auch die Poisonklammer $\{\phi_1, \phi_2\}$ zweier Erhaltungsgrößen eine Erhaltungsgröße

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\{\phi_1, \phi_2\} &= \{\{\phi_1, \phi_2\}, \mathscr{H}\} + \partial_t\{\phi_1, \phi_2\} \\
&= \{\{\phi_1, \mathscr{H}\}, \phi_2\} + \{\phi_1, \{\phi_2, \mathscr{H}\}\} + \{\partial_t\phi_1, \phi_2\} + \{\phi_1, \partial_t\phi_2\} \\
&= \{\{\phi_1, \mathscr{H}\} + \partial_t\phi_1, \phi_2\} + \{\phi_1, \{\phi_2, \mathscr{H}\} + \partial_t\phi_2\} \\
&= \{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\phi_1, \phi_2\} + \{\phi_1, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\phi_2\} = 0 \ .
\end{aligned} \tag{1.30}$$

Für die zweite Zeile haben wir die Produktregeln (1.18) und (1.20) benutzt.

Die Poisson-Klammer zweier Erhaltungsgrößen ϕ_1 und ϕ_2 ist normalerweise keine Funktion $f(\phi_1, \phi_2)$ der beiden Erhaltungsgrößen und kann eine unabhängige, neue Erhaltungsgröße sein. Ist zum Beispiel die x-Komponente $L_1 = y\,p_z - z\,p_y$ des Drehimpulses und die y-Komponente $L_2 = z\,p_x - x\,p_z$ erhalten, so ist $L_3 = x\,p_y - y\,p_x$ erhalten, denn wie man durch Nachrechnen bestätigt, gilt

$$\{L_1, L_2\} = L_3 \ . \tag{1.31}$$

Zusammenfassend schreiben sich die Poisson-Klammern der Drehimpulse als[1]

$$\{L_i, L_j\} = \varepsilon_{ijk}\,L_k \quad i, j, k \in 1, 2, 3 \ . \tag{1.32}$$

Diese algebraischen Relationen stimmen mit den Kommutatorrelationen des negativen der Vektorfeldern

$$v_1 = y\,\partial_z - z\,\partial_y\,, \quad v_2 = z\,\partial_x - x\,\partial_z\,, \quad v_3 = x\,\partial_y - y\,\partial_x \tag{1.33}$$

überein, die zu Drehungen in drei Dimensionen gehören, also zur Gruppe $O(3)$ der orthogonalen 3×3-Matrizen. Der Kommutator zweier linearer Operatoren A und B ist als

$$[A, B] = A\,B - B\,A \tag{1.34}$$

definiert. Für die Differentialoperatoren v_i gilt

$$[-v_i, -v_j] = \varepsilon_{ijk}\,(-v_k) \tag{1.35}$$

Ein Vektorraum mit einem bilinearen (1.15,1.16) Produkt $[A, B]$, das antisymmetrisch (1.17) ist und die Jacobi-Identität (1.19) erfüllt, ist eine Lie-Algebra. Die Drehimpulse sind Basiselemente der zur Drehgruppe in drei Dimensionen, der O(3), gehörigen Lie-Algebra mit der Poisson-Klammer als antisymmetrischem Produkt.

[1] ε_{ijk} ist total antisymmetrisch, $\varepsilon_{123} = 1$.

1.5 Noether-Theorem

In der Hamiltonschen Formulierung des Bewegungsablaufs mechanischer System sieht man leicht, daß zu jeder kontinuierlichen Symmetrie der Wirkung eine Erhaltungsgröße gehört und daß diese Erhaltungsgröße die Symmetrie erzeugt.

Eine Symmetrie ist eine umkehrbare Abbildung T des Phasenraumes auf sich,

$$T : (t, q, p) \to (t, q'(t, q, p), p'(t, q, p)) \ , \tag{1.36}$$

die den Integranden $\big(p_j\, \dot{q}^j - \mathscr{H}(t, q, p)\big)$ der Wirkung nur um eine Zeitableitung einer zur Transformation gehörigen Funktion $\hat{F}$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{F} = \dot{q}^j\, \partial_{q^j} \hat{F} + \dot{p}_j\, \partial_{p_j} \hat{F} + \partial_t \hat{F} \tag{1.37}$$

ändert und die Wirkung daher bis auf Randterme invariant läßt.

$$p_j\, \dot{q}^j - \mathscr{H}(t, q, p) = p'_j\, \dot{q}'^{\,j} - \mathscr{H}(t, q', p') + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{F} \tag{1.38}$$

Die Transformation sei kontinuierlich und gehöre zu einer einparametrigen differenzierbaren Untergruppe von Transformationen T_α. Wir unterstellen, daß die Parametrisierung so gewählt ist, daß $T_{\alpha+\beta} = T_\alpha \circ T_\beta$ gilt, dann gehört T_0 zur identischen Abbildung und $T_{-\alpha}$ zur inversen Abbildung ${T_\alpha}^{-1}$. Die Ableitung nach dem Transformationsparameter bei der identischen Abbildung $\partial_\alpha T_{\alpha|_{\alpha=0}}$ heißt infinitesimale Transformation $(\delta q, \delta p)$.

$$(\delta q, \delta p) = \partial_\alpha T_{\alpha|_{\alpha=0}}(q, p) = \partial_{\alpha|_{\alpha=0}}(q', p') \tag{1.39}$$

Wir beschränken uns auf Transformationen, bei denen δq und δp nur von (t, q, p) abhängen, nicht aber von $\dot{q}$ oder $\dot{p}$.

Differenzieren wir (1.38) bei $\alpha = 0$ und bezeichnen wir die Funktion $\partial_\alpha \hat{F}_{|_{\alpha=0}}$ mit F und $F + p_j\, \delta q^j$ mit ϕ, so folgt

$$\begin{aligned}
0 &= \delta p_j\, \dot{q}^j + p_j\, \dot{\delta q^j} - \delta q^j\, \partial_{q^j} \mathscr{H} - \delta p_j\, \partial_{p_j} \mathscr{H} + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} F \\
&= \delta p_j\, \dot{q}^j - \dot{p}_j\, \delta q^j - \delta q^j\, \partial_{q^j} \mathscr{H} - \delta p_j\, \partial_{p_j} \mathscr{H} + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \phi \\
&= \dot{q}^j\, (\delta p_j + \partial_{q^j} \phi) - \dot{p}_j\, (\delta q^j - \partial_{p_j} \phi) - \delta q^j\, \partial_{q^j} \mathscr{H} - \delta p_j\, \partial_{p_j} \mathscr{H} + \partial_t \phi
\end{aligned} \tag{1.40}$$

Diese Gleichung muß identisch in $(t, q, p, \dot{q}, \dot{p})$ gelten, wenn die Wirkung für *alle* Bahnen bis auf Randterme invariant unter infinitesimalen Transformationen ist. Also sind die infinitesimalen Symmetrien δq und δp Ableitungen der Funktion ϕ

$$\delta q^j = \partial_{p_j} \phi\,, \quad \delta p_j = -\partial_{q^j} \phi\ . \tag{1.41}$$

Zudem müssen in (1.40) die Terme ohne $\dot{q}$ oder $\dot{p}$ verschwinden.

$$0 = -\delta p_j\, \partial_{p_j} \mathscr{H} - \delta q^j\, \partial_{q^j} \mathscr{H} + \partial_t \phi = \partial_{q^j} \phi\, \partial_{p_j} \mathscr{H} - \partial_{p_j} \phi\, \partial_{q^j} \mathscr{H} + \partial_t \phi \tag{1.42}$$

Also ist ϕ eine Erhaltungsgröße.

Noether-Theorem: *Zu jeder infinitesimalen Symmetrie der Wirkung (1.9) gehört eine Erhaltungsgröße ϕ,*

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\phi = \{\phi, \mathscr{H}\} + \partial_t \phi = 0 \ , \tag{1.43}$$

die die infinitesimale Symmetrie durch ihre Poisson-Klammer erzeugt,

$$\delta q^j = \{q^j, \phi\} \ , \quad \delta p_j = \{p_j, \phi\} \ , \tag{1.44}$$

und umgekehrt erzeugt jede Erhaltungsgröße ϕ durch ihre Poisson-Klammer eine infinitesimale Symmetrie.

Funktionen von Punkten transformieren kontragedient zu Punkten, das heißt, die transformierte Funktion Tf hat am transformierten Ort denselben Wert wie die ursprüngliche Funktion f am Urbild oder $Tf(Tx) = f(x)$

$$Tf(x) = f \circ T^{-1}(x) \ . \tag{1.45}$$

Differenzieren wir hier nach dem Transformationsparameter bei $\alpha = 0$, so erhalten wir die infinitesimale Transformation

$$\delta f = -\delta x^a \, \partial_a f \ . \tag{1.46}$$

Auf Funktionen des Phasenraums erzeugen daher Erhaltungsgrößen die Transformationen

$$\delta f = \{\phi, f\} \ , \tag{1.47}$$

dabei ist $\delta = -\delta q^i \, \partial_{q^i} - \delta p_i \, \partial_{p_i}$ ein Differentialoperator erster Ordnung.

Die Erhaltungsgrößen ϕ_r mit der Poisson-Klammer als Lie-Produkt genügen derselben Lie-Algebra wie die zugehörigen Differentialoperatoren δ_r mit dem Kommutator als Lie-Produkt. Dies folgt mit der Jacobi-Identität (1.19).

$$\begin{aligned} \{\{\phi_r, \phi_s\}, f\} &= \{\phi_r, \{\phi_s, f\}\} - \{\phi_s, \{\phi_r, f\}\} \\ &= \{\phi_r, \delta_s f\} - \{\phi_s, \delta_r f\} = \delta_r \delta_s f - \delta_s \delta_r f = [\delta_r, \delta_s] f \end{aligned} \tag{1.48}$$

Genügen also die Erhaltungsgrößen einer Lie-Algebra $\{\phi_r, \phi_s\} = {c_{rs}}^t \phi_t$ mit konstanten ${c_{rs}}^t$, so gilt $[\delta_r, \delta_s] = {c_{rs}}^t \delta_t$ mit denselben Strukturkonstanten ${c_{rs}}^t$.

2 Flächentreue Zeitentwicklung

Wir betrachten Flächen $\mathscr{F}$ in einer Mannigfaltigkeit $\mathscr{M}$, die als Abbildung eines Parameterbereiches $\mathscr{B} \subset \mathbb{R}^2$ parametrisiert sind,

$$\mathscr{F} : \begin{cases} \mathscr{B} \subset \mathbb{R}^2 & \to \quad \mathscr{M} \\ (\lambda^1, \lambda^2) & \mapsto \quad x(\lambda^1, \lambda^2) \end{cases} \quad . \tag{2.1}$$

Zwei-Formen

$$\omega = \frac{1}{2}\,\omega_{mn}(x)\,\mathrm{d}x^m\,\mathrm{d}x^n \ , \quad \omega_{mn} = -\omega_{nm} \tag{2.2}$$

sind Integranden für Flächenintegrationen. Ihr Integral über $\mathscr{F}$ ist durch

$$\int_{\mathscr{F}} \omega = \int_{\mathscr{B}} \mathrm{d}^2\lambda\,\frac{1}{2}\,\bigl(\frac{\partial x^m}{\partial \lambda^1}\,\frac{\partial x^n}{\partial \lambda^2} - \frac{\partial x^n}{\partial \lambda^1}\,\frac{\partial x^m}{\partial \lambda^2}\bigr)\,\omega_{mn}(x(\lambda^1,\lambda^2)) \tag{2.3}$$

definiert. Schreiben wir dies mit dem antisymmetrischen ε-Symbol

$$\varepsilon^{ij} = -\varepsilon^{ji}\,, \quad \varepsilon^{12} = 1\,, \quad i,j \in \{1,2\} \tag{2.4}$$

kompakter als

$$\int_{\mathscr{B}} \mathrm{d}^2\lambda\,\frac{1}{2}\,\varepsilon^{ij}\,\frac{\partial x^m}{\partial \lambda^i}\,\frac{\partial x^n}{\partial \lambda^j}\,\omega_{mn}(x(\lambda)) \tag{2.5}$$

so sieht man leicht, daß solche Integrale nicht von der Parametrisierung der Fläche abhängen. Sei nämlich die Fläche durch λ' parametrisiert und hängt der Parameterbereich $\mathscr{B}$ durch die invertierbare Reparametrisierung $\lambda(\lambda')$ mit dem Bereich $\mathscr{B}'$ zusammen, $\mathscr{B} = \lambda(\mathscr{B}')$, so ist wegen der Kettenregel

$$\frac{\partial x^m}{\partial \lambda'^i} = \frac{\partial \lambda^k}{\partial \lambda'^i}\,\frac{\partial x^m}{\partial \lambda^k} \tag{2.6}$$

und der Determinantenrelation

$$\varepsilon^{ij}\,\frac{\partial \lambda^k}{\partial \lambda'^i}\,\frac{\partial \lambda^l}{\partial \lambda'^j} = \varepsilon^{kl}\,\det\bigl(\frac{\partial \lambda}{\partial \lambda'}\bigr) \tag{2.7}$$

sowie dem Integraltransformationssatz

$$\int_{\mathscr{B}'} \mathrm{d}^2\lambda'\,\bigl|\det\bigl(\frac{\partial \lambda}{\partial \lambda'}\bigr)\bigr|\,f(\lambda(\lambda')) = \int_{\lambda(\mathscr{B}')} \mathrm{d}^2\lambda\,f(\lambda) \tag{2.8}$$

das Integral (2.5) bei orientierungstreuen Reparametrisierungen, $\det\bigl(\frac{\partial\lambda}{\partial\lambda'}\bigr) > 0$, gleich dem Integral

$$\int_{\mathscr{B}'} \mathrm{d}^2\lambda'\,\frac{1}{2}\,\varepsilon^{ij}\,\frac{\partial x^m}{\partial \lambda'^i}\,\frac{\partial x^n}{\partial \lambda'^j}\,\omega_{mn}(x(\lambda(\lambda')))\ . \tag{2.9}$$

Eine Fläche im Phasenraum $\mathscr{P}$, die durch $(q(\lambda), p(\lambda))$ gegeben ist, wird verschleppt, wenn die Punkte (q, p) sich im Laufe der Zeit längs physikalischer Bahnen bewegen. Die Zeitentwicklung im Phasenraum definiert eine Schar von Flächen $(q(\lambda, t), p(\lambda, t))$, wobei für festes (λ^1, λ^2) als Funktion von t die Hamiltongleichungen

$$\partial_t q^a = \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p_a} \quad \partial_t p_a = -\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial q^a} \tag{2.10}$$

erfüllt sind. Zur Anfangszeit liege die Anfangsfläche $\mathscr{F}_0$ mit $(q(\lambda, t = 0), p(\lambda, t = 0))$ vor.

Wir schreiben die Indizes der Phasenraumkoordinaten im folgenden nicht immer aus, um das Formelbild nicht zu überfrachten.

Lassen wir die Phasenraumpunkte verschieden lange Zeiten $t(\lambda^1, \lambda^2)$ durchlaufen, so können wir die am Ende enstehende Fläche $(q(\lambda, t(\lambda)), p(\lambda, t(\lambda)))$ als Fläche $\mathscr{F}_1$ in eine Schar von Flächen $\mathscr{F}_\alpha$ einbetten, die durch

$$\mathscr{F}_\alpha :\ \lambda \mapsto (q(\lambda, t(\lambda, \alpha)), p(\lambda, t(\lambda, \alpha))) \tag{2.11}$$

mit $t(\lambda, 0) = 0$ und $t(\lambda, 1) = t(\lambda)$ gegeben sind.

Flächentreuer Hamiltonscher Fluß: *Die Flächenintegrale*

$$\int_{\mathscr{F}_\alpha} \mathrm{d}p_a \mathrm{d}q^a - \mathrm{d}\mathscr{H}\,\mathrm{d}t \tag{2.12}$$

sind unabhängig von α.

Beweis: Ausführlicher, allerdings ohne Index der Phasenraumkoordinaten geschrieben, lautet der erste Term des Integranden

$$\begin{aligned}\mathrm{d}p\,\mathrm{d}q &= \mathrm{d}^2\lambda\,\varepsilon^{ij}\,\big(\frac{\partial p}{\partial \lambda^i} + \frac{\partial p}{\partial t}\frac{\partial t}{\partial \lambda^i}\big)\,\big(\frac{\partial q}{\partial \lambda^j} + \frac{\partial q}{\partial t}\frac{\partial t}{\partial \lambda^j}\big)\\ &= \mathrm{d}^2\lambda\,\varepsilon^{ij}\,\big(\frac{\partial p}{\partial \lambda^i}\frac{\partial q}{\partial \lambda^j} + \frac{\partial p}{\partial t}\frac{\partial t}{\partial \lambda^i}\frac{\partial q}{\partial \lambda^j} + \frac{\partial p}{\partial \lambda^i}\frac{\partial q}{\partial t}\frac{\partial t}{\partial \lambda^j}\big)\ .\end{aligned} \tag{2.13}$$

Die Produkte $\frac{\partial t}{\partial \lambda^i}\frac{\partial t}{\partial \lambda^j}$ tragen nicht bei, denn sie werden mit ε^{ij} summiert. Der Ausdruck ist aufgrund der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen gleich

$$\mathrm{d}p\,\mathrm{d}q = \mathrm{d}^2\lambda\,\varepsilon^{ij}\,\big(\frac{\partial p}{\partial \lambda^i}\frac{\partial q}{\partial \lambda^j} - \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial q}\frac{\partial t}{\partial \lambda^i}\frac{\partial q}{\partial \lambda^j} + \frac{\partial p}{\partial \lambda^i}\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p}\frac{\partial t}{\partial \lambda^j}\big)\ . \tag{2.14}$$

Der zweite Term des Integranden ist

$$-\mathrm{d}\mathscr{H}\,\mathrm{d}t = -\mathrm{d}^2\lambda\,\varepsilon^{ij}\,\big(\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p}\big(\frac{\partial p}{\partial \lambda^i} + \frac{\partial p}{\partial t}\frac{\partial t}{\partial \lambda^i}\big) + \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial q}\big(\frac{\partial q}{\partial \lambda^i} + \frac{\partial q}{\partial t}\frac{\partial t}{\partial \lambda^i}\big) + \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial t}\frac{\partial t}{\partial \lambda^i}\big)\frac{\partial t}{\partial \lambda^j}\ . \tag{2.15}$$

Hier verschwinden alle Beiträge mit einem Faktor $\frac{\partial t}{\partial \lambda^i}$, da sie mit $\varepsilon^{ij}\,\frac{\partial t}{\partial \lambda^j}$ summiert werden,

$$-\mathrm{d}^2\lambda\,\varepsilon^{ij}\,\big(\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial \lambda^i} + \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial \lambda^i}\big)\frac{\partial t}{\partial \lambda^j}\ . \tag{2.16}$$

Zusammen genommen heben sich im Integranden wegen $\varepsilon^{ij} = -\varepsilon^{ji}$ die Terme, die $\mathscr{H}$ enthalten, weg und der Integrand ist einfach

$$\mathrm{d}p\,\mathrm{d}q - \mathrm{d}\mathscr{H}\,\mathrm{d}t = \mathrm{d}^2\lambda\,\varepsilon^{ij}\,\frac{\partial p}{\partial\lambda^i}\frac{\partial q}{\partial\lambda^j}\ . \tag{2.17}$$

Die partiellen Ableitungen differenzieren hier bei konstanter Zeit und lassen eine eventuelle unterschiedliche, λ-abhängige Laufzeit $t(\lambda,\alpha)$ unberücksichtigt.

Dieser Integrand ist bei zeitunabhängiger Hamiltonfunktion trotz der Abhängigkeit von $t(\lambda,\alpha)$ unabhängig von α. Leiten wir nämlich nach α ab, so erhalten wir

$$\varepsilon^{ij}\,\frac{\partial}{\partial\alpha}\big(\frac{\partial p}{\partial\lambda^i}\frac{\partial q}{\partial\lambda^j}\big) = \frac{\partial t}{\partial\alpha}\,\varepsilon^{ij}\,\big(\big(\frac{\partial}{\partial\lambda^i}\frac{\partial p}{\partial t}\big)\frac{\partial q}{\partial\lambda^j} + \frac{\partial p}{\partial\lambda^i}\big(\frac{\partial}{\partial\lambda^j}\frac{\partial q}{\partial t}\big)\big)\ . \tag{2.18}$$

Wegen der Antisymmetrie von ε^{ij} ist dies auch gleich

$$= \frac{\partial t}{\partial\alpha}\,\varepsilon^{ij}\,\big(\frac{\partial}{\partial\lambda^i}\big(\frac{\partial p}{\partial t}\frac{\partial q}{\partial\lambda^j}\big) - \frac{\partial}{\partial\lambda^i}\big(\frac{\partial p}{\partial\lambda^j}\frac{\partial q}{\partial t}\big)\big) \tag{2.19}$$

und verschwindet wegen der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen,

$$= -\frac{\partial t}{\partial\alpha}\,\varepsilon^{ij}\,\frac{\partial}{\partial\lambda^i}\big(\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial\lambda^j} + \frac{\partial p}{\partial\lambda^j}\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial p}\big) = -\frac{\partial t}{\partial\alpha}\,\varepsilon^{ij}\,\frac{\partial}{\partial\lambda^i}\frac{\partial}{\partial\lambda^j}\mathscr{H} = 0\ . \tag{2.20}$$

Damit ist gezeigt, daß das Integral (2.12) unverändert bleibt, wenn die Zeitentwicklung die Anfangsfläche $\mathscr{F}_0$ verschleppt. Der Satz wird insbesondere verwendet für den Fall, daß die Fläche $\mathscr{F}$ aus Punkten gleicher Energie $\mathrm{d}\mathscr{H} = 0$ besteht, zum Beispiel bei der Poincaréschen Wiederkehrabbildung, oder aus Punkten gleicher Zeit $\frac{\partial t}{\partial\lambda^i} = 0$ und $\mathrm{d}t = 0$. Solch eine Fläche bewahrt während ihrer Zeitentwicklung das Flächenmaß $\omega = \mathrm{d}p_a\,\mathrm{d}q^a$.

Da das Volumen $\mathrm{d}^n p\,\mathrm{d}^n q$ im Phasenraum bis auf Vorzeichen und den Faktor $n!$ mit ω^n übereinstimmt, folgt aus der Flächentreue auch die Volumentreue der Hamiltonschen Zeitentwicklung.

Liouville-Theorem: *Das Volumen jeder Untermenge $\mathscr{U}$ des Phasenraums ändert sich nicht bei der Hamiltonschen Zeitentwicklung.*

Auch wenn das Liouville-Theorem schon aus der Flächentreue folgt, lohnt es doch, das Theorem auf eine zweite Art zu beweisen und hierbei allgemein nützliche Kenntnisse über Determinanten ins Gedächtnis zu rufen.

Die Determinante einer Matrix M ist eine polynomiale Funktion der Matrixelemente ${M^i}_j$. Aus ihrer Definition

$$\det M = \varepsilon_{i_1 i_2 \dots i_n}{M^{i_1}}_1{M^{i_2}}_2\dots{M^{i_n}}_n \tag{2.21}$$

folgt durch Differenzieren

$$\frac{\partial\det M}{\partial{M^i}_j} = \varepsilon_{i_1,\dots,i_{j-1},i,i_{j+1},\dots i_n}{M^{i_1}}_1\dots{M^{i_{j-1}}}_{j-1}{M^{i_{j+1}}}_{j+1}\dots{M^{i_n}}_n\ . \tag{2.22}$$

Multipliziert man das Ergebnis mit ${M^i}_l$ und summiert über i, so erhält man wieder die Determinante, wenn $l = j$ ist. Im anderen Fall $l \neq j$ erhält man Null, weil in der

Summe mit dem ε- Symbol schon $M^{i_l}{}_l$ steht und ε total antisymmetrisch ist. Damit ist die Ableitung $\frac{\partial \det M}{\partial M^i{}_j}$ identifiziert.

$$\frac{\partial \det M}{\partial M^i{}_j} = \det M (M^{-1})^j{}_i \tag{2.23}$$

Die Ableitung der Determinante einer zeitabhängigen Matrix $M(t)$ ist daher nach Kettenregel

$$\partial_t \det M(t) = \det M (M^{-1})^j{}_i \, \partial_t M^i{}_j \ . \tag{2.24}$$

Ist zur Zeit $t = 0$ die Matrix $M(0) = \mathbb{1}$, so ist dann die Zeitableitung der Determinante die Spur der abgeleiteten Matrix $\partial_t M_{|t=0}$

$$\partial_t \det M_{|t=0} = 1 \cdot \delta^i{}_j \, \partial_t M^i{}_{j|t=0} = \partial_t M^i{}_{i|t=0} = \operatorname{tr} \, \partial_t M_{|t=0} \tag{2.25}$$

Der Hamiltonsche Zeitfluß im Phasenraum kann bei zeitunabhängiger Hamiltonfunktion als einparametrige Transformationsgruppe T_t angesehen werden, die jeden Punkt $x = x'(0,x)$ des Phasenraumes im Laufe der Zeit t auf $T_t x = x'(t,x)$ abbildet. Die Transformationsgruppe hängt differenzierbar von t ab und ist so parametrisiert, daß $T_{t_1} T_{t_2} = T_{t_1+t_2}$ gilt.

Das Volumenelement transformiert mit der Jacobi-Determinante

$$\mathrm{d}^n(T_t x) = \mathrm{d}^n x \ \det \frac{\partial T_t x}{\partial x} \tag{2.26}$$

Wegen $T_{t+\varepsilon} = T_t T_\varepsilon$ gilt für die Jacobi-Matrizen der partiellen Ableitungen

$$\left(\frac{\partial T_{t+\varepsilon} x}{\partial x}\right) = \left(\frac{\partial T_t x}{\partial x}\right)_{|T_\varepsilon x} \left(\frac{\partial T_\varepsilon x}{\partial x}\right) \ , \quad \left(\frac{\partial T_0 x}{\partial x}\right) = \mathbb{1} \tag{2.27}$$

und für die Determinanten

$$\det\left(\frac{\partial T_{t+\varepsilon} x}{\partial x}\right) = \det\left(\frac{\partial T_t x}{\partial x}\right)_{|T_\varepsilon x} \det\left(\frac{\partial T_\varepsilon x}{\partial x}\right) \tag{2.28}$$

Daher folgt für die Ableitung nach t

$$\partial_t \det\left(\frac{\partial T_t x}{\partial x}\right) = \partial_\varepsilon \det\left(\frac{\partial T_{t+\varepsilon} x}{\partial x}\right)_{|\varepsilon=0} = \det\left(\frac{\partial T_t x}{\partial x}\right) \partial_t \det\left(\frac{\partial T_t x}{\partial x}\right)_{|t=0} \ . \tag{2.29}$$

Zur Zeit $t = 0$ ist die Jacobi-Matrix $\frac{\partial x'}{\partial x}{}_{|t=0} = \mathbb{1}$ und die Zeitableitung der Determinante ist daher wegen (2.25)

$$\partial_t \det\left(\frac{\partial T_t x}{\partial x}\right)_{|t=0} = (\partial_t \partial_{x^a} x'^a)_{|t=0} = \partial_{x^a} (\partial_t x'^a)_{|t=0} \ . \tag{2.30}$$

Wegen der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (1.25) $\partial_t x'^a_{|t=0} = I^{ab} \partial_b \mathscr{H}$ und der Antisymmtrie $I^{ab} = -I^{ba}$ verschwindet die Zeitableitung der Jacobi-Determinante für $t = 0$ und daher wegen (2.29) zu allen Zeiten.

$$\partial_{x^a} \partial_t x'^a_{|t=0} = I^{ab} \partial_a \partial_b \mathscr{H} = 0 \tag{2.31}$$

Das Liouville-Theorem wird normalerweise so gelesen, als sage es aus, daß eine anfängliche Unkenntnis der genauen Anfangsbedingungen sich nicht durch die Zeitentwicklung ändere. Ist nämlich das System nicht genau bei (q, p) sondern in einem kleinen Volumenelement $\mathrm{d}^n q \, \mathrm{d}^n p$ bei (q, p), so vergrößert sich dieses Volumen und demnach die Unkenntnis nicht im Laufe der Zeit.

Diese Deutung des Liouville-Theorems ist zu optimistisch: man mache sich klar, daß sich zum Beispiel Volumen von Sahne durch Rühren nicht ändert und daß auch Schlagsahne kein größeres Volumen als die ursprüngliche Sahne hat, wenn die vielen kleinen Luftblasen in der Schlagsahne abzieht. Dennoch ist Schlagsahne über ein größeres Volumen verteilt als die ursprüngliche Sahne.

Das mikroskopisch genaue Volumen eines Phasenraumelements ist ein unrealistisches Maß für die Unkenntnis.

3 Integrabilität

Die Existenz von genügend vielen Erhaltungsgrößen ist notwendig und hinreichend für die Integrabilität der Bewegungsgleichungen. Aus dem Kolmogorov-Arnold-Moser-Theorem ergibt sich, daß Bewegungsgleichungen, die ein wenig von Bewegungsgleichungen integrabler Systeme abweichen, abhängig von den Anfangsbedingungen zu integrablen und auch chaotischen Bahnkurven führen. Ist die Störung, die Abweichung vom integrablen Bewegungsgesetz, klein, so haben chaotische Bahnen ein kleines Maß im Raum der Anfangsbedingungen. Diese exakten Resultate klären, daß die störungstheoretischen Näherungen der Bahnkurven das Langzeitverhalten dynamischer Systeme nicht richtig erfassen, da sich auf integrablen Bahnen durch Störungen nicht nur, wie in der Störungstheorie, Frequenzsummen sondern auch Bruchteile der beteiligten Frequenzen ergeben.

Entscheidend für die Herleitung dieser allgemeinen Eigenschaften ist die Tatsache, daß die Hamiltonsche Zeitentwicklung eine flächentreue Selbstabbildung des Phasenraumes ist.

Die algebraischen Strukturen der Hamiltonschen Mechanik sind Ausgangspunkt der kanonischen Quantisierung.

Literaturverzeichnis

[1] Paul A. M. Dirac, Lectures on Quantum Mechanics, William Clowes and Sons, London, (1964)

[2] Vladimir I. Arnol'd, Mathematical Methods of Classical Mechanics, Springer-Verlag, Heidelberg, (1980)

[3] Jürgen Moser, Stable and Random Motion in Dynamical Systems, Princeton University Press, Princeton, (1973)

[4] M. V. Berry, Regular and Irregular Motion, Amer. Inst. Phys. Conf. Proceedings Nr.46, Topics in Nonlinear Dynamics, S.Jorna ed. AIP, (1978)

[5] G. Eilenberger, Reguläres und chaotisches Verhalten Hamiltonscher Systeme, 14. Ferienkurs Nichtlineare Dynamik in kondensierter Materie, Kernforschungsanlage Jülich, 1983