13 Hamilton-Formalismus

13.1 Die Legendre-Transformation

Erinnerung: Inverse Funktion

Sei $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ eine Fkt. mit $f'(x) \neq 0$ (in einem gewissen Intervall). Dann können wir zur inversen Fkt. $g = f^{-1}$ (ebenfalls mit $g: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$) übergehen.
Beispiel: $f: x \to x^2$; $g: x \to \sqrt{x}$. Zweimaliges Invertieren gibt offensichtlich die ursprüngliche Fkt. zurück.

Legendre-Transformation

- Sei $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ eine Fkt. mit $f''(x) \neq 0$ (in gewissen Intervall). Die Fkt. $g: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ heißt Legendre-Transformierte von f falls
$$f' = g'^{-1} .$$
($g': \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ ist die zu $f': \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ inverse Funktion)
- Wir brauchen $f'' \neq 0$ damit f' invertierbar ist.
- Obiges definiert g nur bis auf eine additive Konstante (die wir gleich fixieren werden).

Explizite Bestimmung von g:

$$f' = g'^{-1} \Rightarrow f'(x) = g'^{-1}(x) \Rightarrow g'(f'(x)) = g'(g'^{-1}(x))$$

$$\Rightarrow g'(f'(x)) = x .$$

Sei nun $f'(x) = u$. Dann gilt $g'(u) = x$ und

$$g(u) = \int x\,du = \int x\,d(f'(x)) = \int x f''(x)\,dx$$

$$= x f'(x) - \int f'(x)\,dx \underset{\uparrow}{=} x \cdot u - f(x)$$

Fixieren der additiven Konstanten.

Vollständige Definition:

Die Legendre-Trf.-e einer reellen Fkt. f ist durch

$$\| \; g(u) = x \cdot u - f(x) \quad \text{mit} \quad u = f'(x) \; \|$$

(nach x aufzulösen)

definierte Fkt. $g: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.

Wichtige Eigenschaften: • $g'(u) = \frac{d}{du}\left[x(u) \cdot u - f(x(u))\right]$

$$= u \cdot \frac{dx}{du} + x - f'(x) \cdot \frac{dx}{du} = x \quad (\text{analog zu } f'(x) = u).$$

• Aufgrund der anfänglich gegebenen Definition ($f' = g'^{-1}$) erwarten wir, daß zweimaliges Legendre-Transformieren zur Funktion selbst zurückführt. In der Tat:

$$f: x \to f(x) \quad \frown\!\!\!> \quad g: u \to g(u) \quad \frown\!\!\!> \quad h: z \to h(z)$$

mit $g(u) = xu - f(x)$ & $u = f'(x)$ mit $h(z) = u \cdot z - g(u)$, $z = g'(u)$

liefert: $h(z) = f'(x) \cdot g'(u) - (xu - f(x)) = f(x) = f(z)$

(weil $z = g'(u) = x$, nach der oben hergeleiteten Eigenschaft der Leg.-Trf.)

Explizites Beispiel:

$$(f: x \to x^2) \xrightarrow{\text{Ableit.}} (f': x \to 2x) \xleftrightarrow{\text{Inver.}} \left(g': x \to \frac{x}{2}\right) \xleftarrow{\text{Ableit.}} \left(g: x \to \frac{x^2}{4}\right)$$

Vergleich mit der zweiten ("handwerklichen") Definition:

$f(x) = x^2$; $g(u) = xu - f(x)$ wobei $u = f'(x) = 2x$

$$\Downarrow$$

$$g(u) = \frac{u}{2} \cdot u - \left(\frac{u}{2}\right)^2 \Longleftarrow x = u/2$$

$$= \frac{u^2}{4} \text{, wie erwartet.}$$

<u>Verallgemeinerung auf 2 Variable</u>

$f(x,y) \xrightarrow{\text{Leg.-Trf.}} g(u,v) = xu + yv - f(x,y)$, wobei $x = x(u,v)$ und $y = y(u,v)$ durch Auflösen des Gleichungssystems $u = \frac{\partial f}{\partial x}$ & $v = \frac{\partial f}{\partial y}$ nach x, y definiert sind.

<u>Verallgemeinerung auf mehrere Variable</u>

$$f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \xrightarrow{\text{Leg.-Trf.}} g: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$$
$$(\bar{x} \mapsto f(\bar{x})) \qquad (\bar{u} \to g(\bar{u}))$$

wobei $g(\bar{u}) = \bar{x} \cdot \bar{u} - f(\bar{x})$ und

$$\bar{u} = \nabla f(\bar{x})$$

<u>Kommentar</u> (fortgeschritten)

Man kann auch im Fall mehrer Variablen die eingangs diskutierte "abstrakte" Definition geben:

$f: X \to \mathbb{R}$ (X - Vektorraum, z.B. $\mathbb{R}^n$)

$g: Y \to \mathbb{R}$ (wobei $Y = X^*$ der Dualraum ist)

Falls g die Leg.-Transformierte zu f ist, gilt

$\nabla f = (\nabla g)^{-1}$, wobei

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla f: X \to Y \\ \nabla g: Y \to X \end{array} \right\}$$ auf die naheliegende Weise als Abbildungen zwischen X & $X^* = Y$ (bzw. Y & $Y^* = X$) aufzufassen sind.

- Man kann die Legendre-Trf. selbstverständlich auch bezüglich eines Teils der Variablen ausführen. Einfachster Fall: $f(x,y) \longrightarrow g(u,y) = xu - f(x,y)$

  mit $u = \frac{\partial f}{\partial x} \Rightarrow x = x(u,y)$

- In der Physik wird oft (speziell in Thermodyn.) eine etwas andere Definition der Legendre-Trf. benutzt:

$$f: x \mapsto f(x) \longrightarrow g: u \to g(u) = f(x) - x \cdot u$$

mit $u = f'(x)$

Dies hat zur Folge, daß die Umkehrtrf.:

$$g: u \to g(u) \longrightarrow h: z \to h(z) = g(u) + z \cdot u$$

mit $z = -g'(u)$

eine etwas andere explizite Form annimmt.

Wichtige Anwendung in der Thermodynamik:

(die hier aber keine Rolle spielen wird)

$U = U(S,V)$ – innere Energie U als Fkt von Entropie S und Volumen V.

$dU = T dS - P dV$, d.h. $T = \frac{\partial U}{\partial S}$ & $P = -\frac{\partial U}{\partial V}$

Die freie Energie $F = F(T,V)$ ergibt sich daraus als Legendre Trf. bzgl. S : $F = U - TS$

[Analog: • Gibbs'sche freie Energie : $G(T,P)$
• Enthalpie : $H(S,P)$]

13.2 Die Hamilton-Funktion

$L = L(q,\dot q,t)$ – Lagrange-Fkt. (Fkt. der unabhängigen Variablen $q, \dot q, t$)

$H = H(q,p,t)$ – Hamilton-Fkt. (Legendre-Trf.-e der Lagrange-Fkt. bzgl. $\dot q$, Fkt. der unabh. Variablen q, $\underbrace{p = \frac{\partial L}{\partial \dot q}}$, t)

Der "zu q kanonisch konjugierte" oder "kanonische" Impuls.

Nochmals explizit: $H(q,p,t) = p\dot q - L(q,\dot q,t)$, wobei $\dot q = \dot q(p,q,t)$ durch $p = \frac{\partial L(q,\dot q,t)}{\partial \dot q}$ definiert ist.

Mit mehreren Variablen:

$$L = L(q_1 \cdots q_n, \dot q_1 \cdots \dot q_n, t)$$

$$H = H(q_1 \cdots q_n, p_1 \cdots p_n, t) = \sum_{i=1}^{n} p_i \dot q_i - L \quad \text{mit } p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot q_i}$$

Falls $L = T - V$ & T homogen vom Grad 2 in den $\dot q_i$ (was hier stets vorausgesetzt sei), gilt:

$$\sum_{i=1}^{n} p_i \dot{q}_i = \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{S.v. Euler}}}{=} 2T$$

$\Rightarrow H = 2T - (T-V) = T+V$; H ist die Energie (ausgedrückt durch q_i & $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$)

Wichtige Einschränkung:

Um das System $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ nach den $\dot{q}_i$ auflösen zu können,

muß $\det\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j}\right) \neq 0$ gelten.

($\{y_i = f_i(\bar{x})\}$ invertierbar falls $\det\left(\frac{\partial y_i}{\partial x_j}\right) \neq 0$)

13.3 Hamiltonsche Bewegungsgleichungen

- $\frac{\partial H}{\partial q} = \frac{\partial H(q,p)}{\partial q}$ (t-Abhängigkeit zur Vereinfachung unterdrückt)

$$= \frac{\partial}{\partial q}\left[p\cdot\dot{q}(p,q) - L(q, \dot{q}(p,q))\right]$$

$$= p\frac{\partial \dot{q}}{\partial q} - \frac{\partial L}{\partial q} - \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}}_{=p}\cdot\frac{\partial \dot{q}}{\partial q} = -\frac{\partial L}{\partial q} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Lagrange-Gl.-en}}}{=} -\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = -\dot{p}$$

- $\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q}$ gilt per Def. der Legendre-Trf.

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q}\,,\quad \frac{\partial H}{\partial q} = -\dot{p}}$$

- Explizite t-Abhängigkeit ändert nichts an der Rechnung
- Die Verallgemeinerung $p, q \to \{p_i\}, \{q_i\}$, $i = 1 \cdots n$ ist einfach:

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = \frac{\partial}{\partial q_i}\left(\sum_j p_j \dot{q}_j - L\right) = \sum_j p_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} - \sum_j \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}}_{p_j} \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i}$$

$$= -\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = -\dot{p}_i$$

also: $$\boxed{\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}}$$ Hamiltonsche Bewegungsgleichungen

13.4 Konfigurationsraum & Phasenraum

① Lagrange-Formalismus

Momentaner Zustand eines Systems ist charakterisiert durch $\{q_i, i=1\cdots n\}$ (= Lage im Konfigurationsraum) und momentane Geschwindigkeiten $\{\dot{q}_i\}$. Zeitentwicklung folgt aus n Diff.gl.-en 2. Ordnung:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L(q,\dot{q})}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L(q,\dot{q})}{\partial q_i} = 0.$$

(hier stehen $q, \dot{q}$ für $q_1 \cdots q_n, \dot{q}_1 \cdots \dot{q}_n$)

② Hamilton-Formalismus

Momentaner Zustand eines Systems ist charakterisiert durch $\{q_i, p_i \ (i=1\cdots n)\}$ (= Lage im "Phasenraum"). Die Zeitentwicklung folgt aus einem System von $2n$ Diff.gl.-en 1. Ordnung:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H(q,p)}{\partial p_i}; \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H(q,p)}{\partial q_i}$$

<u>Einfaches Beispiel:</u> $H = \frac{p^2}{2m} + V(q)$

(Teilchen in Potential)

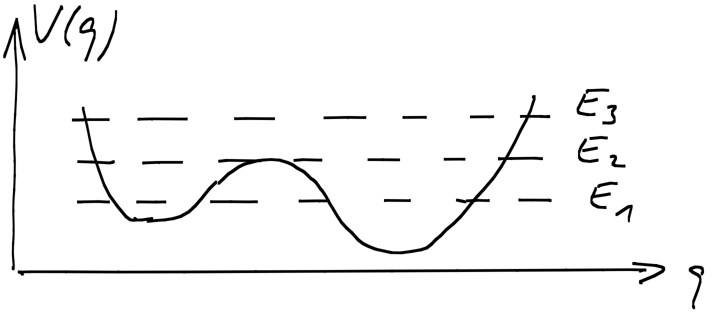
$$\underbrace{\dot p = -\frac{\partial H}{\partial q} = -V'(q)}_{\downarrow} \; ; \; \underbrace{\dot q = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}}_{\Downarrow}$$

Die Hamilton-Formul. bleibt prinzipiell hier stehen und geht zu "weniger Gl.-en höherer Ordnung" über.

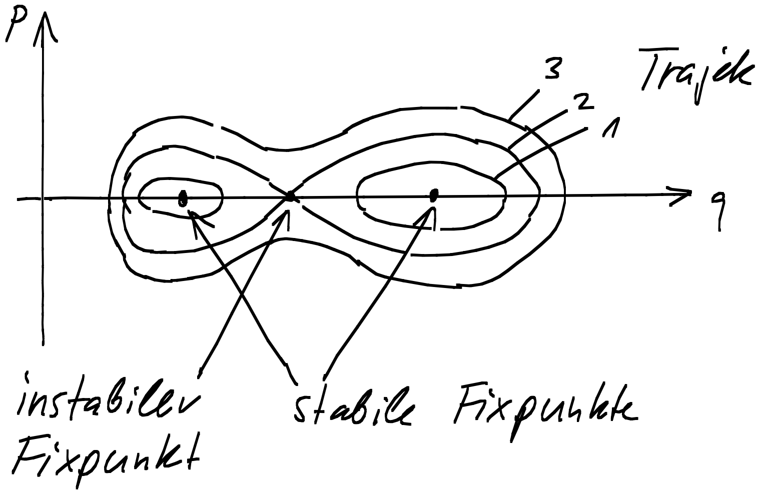
$$m\ddot q = -V'(q) \longleftarrow \{ p = m\dot q \, , \; \dot p = m\ddot q$$

(Newtonsches Grundgesetz)

<u>Veranschaulichung des Phasenraums an diesem Beispiel:</u>
(eindimensionale Bewegung)



$\left(\frac{p^2}{2m} + V(q) = E = const.\right)$



Trajektorien im Phasenraum

$$p = \pm\sqrt{2m(E - V(q))}$$

$$p = p(q)$$

(Trajektorie)

- $\left(-\frac{\partial H}{\partial q}\right)$ & $\left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)$ definieren an jedem Pkt. des Phasenraumes einen Vektor, der die Richtung und Geschw. der Bewegung des Systems im Phasenraum festlegt. Damit ist die Evolution für alle Zeiten bestimmt.