

# Vorlesungsskript - Theoretische Physik II:

## Analytische Mechanik und Statistik/Thermodynamik sowie mathematische Methoden der theoretischen Physik

Arthur Hebecker

Ursprünglicher Textsatz und Grafiken: Viktoria Schubert und Nicolas Schmidt, 2012.  
Nachbearbeitet von Arthur Hebecker 2017 und 2021.

### Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Lagrange-Formalismus</b>	<b>5</b>
1.1	Die Grundidee des Lagrange-Formalismus . . . . .	5
1.2	Variationsrechnung: Der Funktionalbegriff (M) . . . . .	5
1.3	Die Weglänge als Funktional . . . . .	7
1.4	Variationsrechnung: Extremalisierung von Funktionalen (M) . . . . .	8
1.5	Das Hamiltonsche Prinzip (Prinzip der kleinsten Wirkung) . . . . .	9
1.6	Die Form der Lagrange-Funktion und erste Anwendungen . . . . .	10
1.6.1	Massenpunkt im Potential . . . . .	11
1.6.2	System wechselwirkender Massenpunkte . . . . .	11
1.6.3	Perle auf einem Draht . . . . .	11
1.6.4	(Mathematisches) Pendel im Fahrstuhl . . . . .	12
1.7	Vereinfachte Herleitung der Lagrange-Gleichungen . . . . .	13
1.8	Kommentare . . . . .	13
<b>2</b>	<b>Symmetrien und Erhaltungssätze</b>	<b>14</b>
2.1	Symmetriemotivation der Wirkung . . . . .	15
2.1.1	Freier Massenpunkt . . . . .	15
2.1.2	Mehrere Massenpunkte . . . . .	16
2.2	Energieerhaltung . . . . .	16
2.3	Homogene Funktionen und Satz von Euler (M) . . . . .	17
2.4	Erhaltung der verallgemeinerten Impulse . . . . .	19
2.5	Noether-Theorem . . . . .	20

2.6	Mechanische Ähnlichkeit . . . . .	22
2.7	Virialsatz . . . . .	24
<b>3</b>	<b>Trägheitstensor</b>	<b>25</b>
3.1	Trägheitsmoment und Satz von Steiner . . . . .	25
3.2	Trägheitstensor . . . . .	28
3.3	Eigenwerte, Eigenvektoren, Diagonalisierbarkeit (M) . . . . .	29
3.4	Hauptträgheitsachsen . . . . .	31
3.5	Das Trägheitsellipsoid . . . . .	33
3.6	Trägheitstensor und Drehimpuls - mehr zur Geometrie . . . . .	35
<b>4</b>	<b>Kreisel</b>	<b>36</b>
4.1	Eulergleichungen . . . . .	36
4.2	Freier Kreisel - qualitativ . . . . .	37
4.3	Freier Kreisel - analytisch . . . . .	40
4.4	Schwerer Kreisel - vereinfacht . . . . .	41
4.5	Eulerschen Winkel (M) . . . . .	42
4.6	Schwerer Kreisel – exakt . . . . .	42
<b>5</b>	<b>D’Alembertsches Prinzip und Lagrange-Gleichungen 1. und 2. Art</b>	<b>45</b>
5.1	Arten von Zwangsbedingungen . . . . .	46
5.2	Prinzip der virtuellen Arbeit und d’Alembertsches Prinzip . . . . .	47
5.3	D’Alembertsches Prinzip mit verallgemeinerten Koordinaten und Kräften . . . . .	49
5.4	Lagrange-Gleichungen 1. Art . . . . .	51
5.5	Lagrange-Multiplikatoren und Zwangskräfte . . . . .	52
5.6	Lagrange-Gleichungen 2. Art . . . . .	53
5.7	Lagrange-Multiplikatoren – allgemeine Sicht . . . . .	54
<b>6</b>	<b>Hamilton-Formalismus</b>	<b>56</b>
6.1	Legendre-Transformationen (M) . . . . .	56
6.2	Hamilton-Funktion . . . . .	58
6.3	Hamiltonsche Bewegungsgleichungen und Phasenraum . . . . .	59
<b>7</b>	<b>Poisson-Klammern</b>	<b>61</b>

7.1	Definition und erste Anwendungen . . . . .	61
7.2	Die Poissonklammer als Lie-Algebra-Operation . . . . .	62
7.3	Poissonklammern und Vektorfelder . . . . .	63
7.4	Die Drehimpuls-Lie-Algebra in der Hamilton-Mechanik . . . . .	65
7.5	Satz von Liouville . . . . .	66
<b>8</b>	<b>Hamilton-Mechanik in Differentialformen</b>	<b>68</b>
8.1	Tangential- und Cotangentialraum (M) . . . . .	68
8.2	Vektorfelder und 1-Formen (M) . . . . .	70
8.3	Höhere p-Formen (M) . . . . .	71
8.4	Formulierung der Hamilton-Mechanik in Formen . . . . .	72
8.5	Integration von Differentialformen (M) . . . . .	74
<b>9</b>	<b>Kanonische Transformationen, Integrabilität, Chaos</b>	<b>77</b>
9.1	Kanonische Transformation . . . . .	77
9.2	Integrabilität . . . . .	80
9.3	Chaos . . . . .	82
<b>10</b>	<b>Schwingungen und Kontinua</b>	<b>84</b>
10.1	Kleine Schwingungen allgemeiner Systeme . . . . .	84
10.1.1	Ein Freiheitsgrad . . . . .	84
10.1.2	Viele Freiheitsgrade . . . . .	84
10.2	Lineare Kette . . . . .	86
10.3	Schwingende Saite . . . . .	87
10.4	Ideale Hydrodynamik . . . . .	89
10.5	Potentialströmungen . . . . .	92
10.6	Navier-Stokes-Gleichungen . . . . .	93
<b>11</b>	<b>Statistische Mechanik: Kinetik</b>	<b>95</b>
11.1	Verteilungsfunktion im Phasenraum . . . . .	95
11.2	Boltzmann-Gleichung . . . . .	96
11.3	Die Delta-Funktion (M) . . . . .	97
11.4	Die Maxwell-Boltzmann-Verteilung . . . . .	100
11.5	Mittelwert (M) . . . . .	101

11.6 Maxwell-Boltzmann mit konservativen äußeren Kräften . . . . .	103
11.7 Diffusion . . . . .	104
<b>12 Statistische Mechanik: Thermodynamische Gesamtheiten</b>	<b>107</b>
12.1 Der $\Gamma$ -Raum . . . . .	107
12.2 Wahrscheinlichkeit (M) . . . . .	107
12.3 Maß und Wahrscheinlichkeitsraum (M) . . . . .	108
12.4 Das mikrokanonische Ensemble . . . . .	109
12.5 Boltzmann-Verteilung als ‘wahrscheinlichste Verteilung’ . . . . .	110
12.6 Das kanonische Ensemble . . . . .	113
12.7 Vergleich von mikrokanonischem und kanonischem Ensemble . . . . .	115
<b>13 Entropie und thermodynamische Potentiale</b>	<b>116</b>
13.1 Erwartungswerte in gekoppelten Systemen . . . . .	116
13.2 Zustandsdichte . . . . .	117
13.3 Entropie . . . . .	119
13.4 Die Innere Energie als thermodynamisches Potential des mikrokanonischen Ensembles . . . . .	120
13.5 Die freie Energie als thermodynamisches Potential des kanonischen Ensembles	122
13.6 Schlusskommentare zum makroskopischen Zugang . . . . .	123

## Vorbemerkungen

Wir werden uns in diesem Semester etwa im Verhältnis 2:1 mit analytischer Mechanik sowie mit Thermodynamik/Statistik befassen. Zu letzterem Thema erhalten Sie also, trotz seiner sehr großen Bedeutung, zunächst nur eine Einführung. Auf eine tiefere Behandlung müssen Sie bis zur Quantenstatistik (Theorie V) warten.<sup>1</sup>

Der Mechanik-Teil besteht hauptsächlich aus dem Lagrange- und, etwas später, dem Hamilton-Formalismus. Beide sind relativ abstrakt und ihre Eleganz und Nützlichkeit wird sich Ihnen u.U. erst in den folgenden Semestern erschließen. Insbesondere ist die Behandlung von Symmetrien in diesen Zugängen einfacher als mit Newton. Außerdem sind sie unverzichtbar für ein Verständnis der Quantentheorie sowohl von mechanischen Systemen als auch von Teilchenphysik und Gravitation. Aber dies greift weit voraus und pragmatisch gesprochen

---

<sup>1</sup>Der Grund für diese Aufteilung des Stoffes besteht darin, dass Theorie V zwar Teil des Master-, nicht aber des Bachelor-Programms ist. Die vorläufige Einführung in die Thermodynamik/Statistik im letzten Drittel der Theorie II liefert somit das notwendige Minimum an Wissen, ohne dass ein Bachelor-Abschluss unvollständig wäre.

läuft es im Moment darauf hinaus, dass Sie sich einfach auf Lagrange und Hamilton “einlassen” sollten.

Die Literatur ist schier unerschöpflich. Ich habe mich persönlich vor allem von [1], in den fortgeschritteneren Kapiteln zum Hamilton-Formalismus von [2, 3], sowie in den speziellen Kapiteln zu Hydrodynamik und Statistik von [7, 8, 9] inspirieren lassen. Aber auch der Rest des Literaturverzeichnisses am Ende des Skriptes und auf der Webseite dieser Vorlesung (siehe auch Webseite der Theorie I) ist sehr nützlich.

## 1 Lagrange-Formalismus

### 1.1 Die Grundidee des Lagrange-Formalismus

Der Lagrange-Formalismus wurde 1788 von Joseph-Louis Lagrange entwickelt. Methodisch hat diese Formulierung gegenüber Newton den Vorteil größerer Flexibilität und einer vereinfachten Beschreibung von Zwangskräften. Außerdem wird der Zusammenhang zwischen Symmetrien und Erhaltungssätzen klarer. Wichtig ist noch zu erwähnen, dass die aktuelle Diskussion von neuen, fundamentalen physikalischen Gesetzen (in Quantenfeldtheorie, Gravitation, Stringtheorie etc.) fast ausschließlich im Lagrange-Formalismus erfolgt.

Unser zentrales Objekt wird das sogenannte **Wirkungsfunktional**  $S$  sein. Dies ist eine Abbildung

$$S : \text{Trajektorie} \mapsto \text{reelle Zahl.} \quad (1.1)$$

Es wird mit Hilfe einer Funktion, der sogenannten **Lagrange-Funktion**  $L$  definiert.

Die zentrale physikalische Aussage des Formalismus besteht im **Wirkungsprinzip**. (Dieses Prinzip wird oft auch als ‘**Hamilton-Prinzip**’ bezeichnet. Lassen Sie sich davon nicht verwirren – das hat noch nichts mit dem Hamilton-Formalismus zu tun.)

Das Hamilton-Prinzip besagt:

**Eine physikalische Bewegung verläuft so, dass das Wirkungsfunktional extremal wird.**

In den allermeisten Fällen wird dieses Extremum ein Minimum sein, so dass man auch vom ‘**Prinzip der kleinsten Wirkung**’ spricht. Die technische Analyse der Extremalitätsforderung führt auf eine Differentialgleichung, die sogenannte **Euler-Lagrange-Gleichung**. Es ist dies die Bewegungsgleichung des physikalischen Systems und, im einfachsten Fall, natürlich identisch mit der Newtonschen Bewegungsgleichung.

### 1.2 Variationsrechnung: Der Funktionalbegriff (M)

Erinnern wir uns zunächst an den Begriff einer Funktion (mehrerer Variablen)  $y$ . Eine solche Funktion bildet einen Vektor in die reellen Zahlen ab:

$$y : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad y : \bar{x} \mapsto y(\bar{x}). \quad (1.2)$$

Ein Funktional  $F$  ist ganz analog definiert, wobei aber  $\mathbb{R}^n$  durch eine Menge von Funktionen ersetzt wird. In vielen Fällen wird dieser ‘Raum von Funktionen’ ein Vektorraum sein, den wir mit  $\mathbb{V}$  bezeichnen wollen:

$$F : \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad F : y \mapsto F[y]. \quad (1.3)$$

Als einfaches Beispiel wählen wir für  $\mathbb{V}$  den Raum der differenzierbaren Funktionen auf  $[0, 1]$  mit  $y(0) = y(1) = 0$  (Abb. 1). Wenn wir uns  $[0, 1]$  diskretisiert denken, dann ist die Funktion  $y$  durch einen Vektor  $\{y(x_1), \dots, y(x_N)\}$  gegeben und unser Funktional ist eine Funktion mehrerer Variablen. Der echte Funktionalbegriff folgt somit aus dem Funktionsbegriff, wenn  $N \rightarrow \infty$ . Wir wollen diese Möglichkeit der Diskretisierung zur besseren Intuition im Hinterkopf behalten, widmen uns aber weiter dem kontinuierlichen Fall.

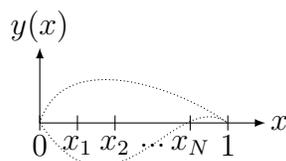


Abbildung 1: Differenzierbare Funktionen auf  $[0, 1]$  mit  $y(0) = y(1) = 0$ . Zwei Beispielfunktionen sowie die im Text angesprochene Diskretisierung von  $x$  sind dargestellt.

Beispielfunktionale zu obigem  $\mathbb{V}$  sind:

$$F_1[y] = y(0.5) \quad (1.4)$$

$$F_2[y] = y'(0.3) \quad (1.5)$$

$$F_3[y] = y(0.1) + y(0.5) + y'(0.9) \quad (1.6)$$

$$F_4[y] = \int_0^1 dx [x y(x)^2 + y'(x)^2] \quad (1.7)$$

$$F_5[y] = \int_0^1 dx f(y(x), y'(x), x). \quad (1.8)$$

Offensichtlich hängt  $F_5$  von der Wahl einer gegebenen Funktion  $f$  von drei Variablen ab.  $F_4$  ist ein Spezialfall zu  $F_5$ , der sich durch die Wahl

$$f(a, b, c) \equiv ca^2 + b^2 \quad (1.9)$$

ergibt. Das letzte Beispiel  $F_5$  wird im Folgenden besonders wichtig sein.

Um es noch konkreter zum machen, betrachten wir die Beispielfunktion (um der Einfachheit willen ignorieren wir die zweite Randbedingung)

$$y_0 : x \mapsto x^2. \quad (1.10)$$

Unter Verwendung von  $y_0'(x) = 2x$  berechnen wir leicht

$$F_1[y_0] = 0.25, \quad F_2[y_0] = 0.6, \quad F_3[y_0] = 0.01 + 0.25 + 1.8 = 2.06. \quad (1.11)$$

Außerdem haben wir

$$F_4[y_0] = \int_0^1 dx [x^5 + 4x^2] = \frac{1}{6} + \frac{4}{3} = \frac{3}{2}. \quad (1.12)$$

Wenn Sie mit dem Ignorieren der zweiten Randbedingung unzufrieden sind, dann betrachten Sie als besseres Beispiel die Funktion  $y_0 : x \mapsto x(1 - x)$ . Die entsprechenden Rechnungen sind nur minimal komplizierter.

### 1.3 Die Weglänge als Funktional

Sei

$$\bar{y} : \tau \mapsto \bar{y}(\tau) \quad \text{mit} \quad \tau \in [0, 1], \quad \bar{y}(0) = \bar{y}_a, \quad \bar{y}(1) = \bar{y}_b \quad (1.13)$$

ein Weg von  $\bar{y}_a$  nach  $\bar{y}_b$ . Die **Weglänge** ist offensichtlich:

$$F[\bar{y}] \equiv \int_{\bar{y}_a}^{\bar{y}_b} |d\bar{y}| = \int_0^1 d\tau \sqrt{\left(\frac{d\bar{y}}{d\tau}(\tau)\right)^2}. \quad (1.14)$$

Dies ist sogar ein Funktional einer vektorwertigen Funktion, beziehungsweise von 3 Funktionen

$$F[\bar{y}] = F[y^1, y^2, y^3]. \quad (1.15)$$

Etwas interessanter ist die **Weglänge im Gebirge**: Sei  $\bar{x}(\tau) = \{x^1(\tau), x^2(\tau)\}$  die Projektion eines Weges im Gebirge auf die horizontale Ebene, vgl. Abb. 2. Anschaulich ist dies der Weg, so wie er auf einer (zweidimensionalen, flachen) Karte abgezeichnet werden kann. Offensichtlich gehört nun aber zu jeder solchen Funktion

$$\bar{x} : \tau \mapsto \bar{x}(\tau) \quad (1.16)$$

eine echte Weglänge  $F[\bar{x}]$ , so wie der Bergsteiger sie im dreidimensionalen Raum zurücklegen muss. Um diese explizit hinzuschreiben, braucht man noch die Höhenfunktion

$$z : \bar{x} \mapsto z(\bar{x}). \quad (1.17)$$

Wir können also den dreidimensionalen Weg  $\bar{y}(\tau)$  als

$$\bar{y}(\tau) = \{y^1(\tau), y^2(\tau), y^3(\tau)\} \equiv \{x^1(\tau), x^2(\tau), z(\bar{x}(\tau))\} \quad (1.18)$$

definieren. Dann erhalten wir die Weglänge wie als

$$F_{\text{Gebirge}}[\bar{x}] = F[\bar{y}[\bar{x}]] = \int d\tau \sqrt{\left(\frac{dx^1(\tau)}{d\tau}\right)^2 + \left(\frac{dx^2(\tau)}{d\tau}\right)^2 + \left(\frac{dz(x^1(\tau), x^2(\tau))}{d\tau}\right)^2}. \quad (1.19)$$

Hier haben wir das oben schon diskutierte Funktional  $F$  für die gewöhnliche dreidimensionale Weglänge verwendet und ihm als Argument den in (1.18) definierten dreidimensionalen Weg gegeben. Der letzte Term unter der Wurzel in (1.19) beschreibt den Zusatzbeitrag der infinitesimalen Höhenänderung.

Es ist offensichtlich, dass die Minimierung (Extremalisierung) solcher Funktionale praktisch wichtig sein kann. Diesem Problem wenden wir uns als Nächstes zu.

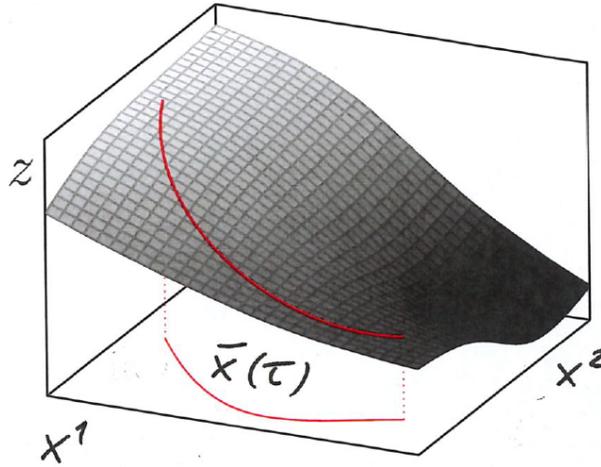


Abbildung 2: Weglänge im Gebirge mit Projektion auf die horizontale Ebene.

## 1.4 Variationsrechnung: Extremalisierung von Funktionalen (M)

Für **Funktionen**  $y : x \mapsto y(x)$  wissen wir schon:

$$y \text{ hat Extremum bei } x_0 \Rightarrow y'(x_0) = 0. \quad (1.20)$$

Wir diskutieren die analoge Aussage für **Funktional**  $F$  nur im Rahmen der speziellen Klasse

$$F[y] \equiv \int_0^1 dx f(y(x), y'(x), x). \quad (1.21)$$

Der Definitionsbereich sei der Raum der zweifach differenzierbaren Funktionen  $y : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$  mit  $y(0) = y_a$  und  $y(1) = y_b$ . Außerdem nehmen wir zunächst an, das Extremum sei schon gefunden, d.h.  $F[y]$  werde durch die Funktion  $y_0$  extremalisiert. Sei weiterhin  $\delta y$  eine beliebige zweifach differenzierbare Funktion mit  $\delta y(0) = \delta y(1) = 0$ . Dann erfüllt

$$y_\alpha \equiv y_0 + \alpha \delta y \quad (1.22)$$

mit  $\alpha \in (-\varepsilon, \varepsilon)$  die Randbedingungen für Funktionen  $y$  und wir können die folgende Abbildung betrachten:

$$(-\varepsilon, \varepsilon) \rightarrow \mathbb{R}, \quad \alpha \mapsto F[y_\alpha]. \quad (1.23)$$

Gemäß unserer Annahme hat diese Abbildung oder Funktion ein Extremum bei  $\alpha = 0$ , also

$$\frac{d}{d\alpha} F[y_\alpha] = 0. \quad (1.24)$$

Wir Taylor-entwickeln  $F[y_\alpha]$  um  $\alpha = 0$ :

$$\begin{aligned} F[y_\alpha] &= \int_0^1 dx f(y_0 + \alpha \delta y, y_0' + \alpha \delta y', x) \\ &= F[y_0] + \int_0^1 dx \left( \frac{\partial f}{\partial y}(y_0, y_0', x) \alpha \delta y + \frac{\partial f}{\partial y'}(y_0, y_0', x) \alpha \delta y' \right) + O(\alpha^2). \end{aligned} \quad (1.25)$$

Gemäß (1.24) muss der in  $\alpha$  lineare Term verschwinden. Da wir  $\alpha$  vor das Integral ziehen können, bedeutet dies

$$\begin{aligned}
 0 &= \int_0^1 dx \left( \frac{\partial f}{\partial y} \delta y + \frac{\partial f}{\partial y'} \frac{d}{dx}(\delta y) \right) \\
 &= \int_0^1 dx \left( \frac{\partial f}{\partial y} \delta y - \frac{d}{dx} \left( \frac{\partial f}{\partial y'} \right) \delta y \right) \quad \left( \text{da } \frac{\partial f}{\partial y'} \delta y = 0 \text{ bei } x = 0, 1 \right) \\
 &= \int_0^1 dx \left( \frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left( \frac{\partial f}{\partial y'} \right) \right) \delta y(x).
 \end{aligned} \tag{1.26}$$

Da dies aber für *beliebige* Funktionen  $\delta y(x)$  gilt, muss der Koeffizient von  $\delta y$  unter dem Integral verschwinden. Wir haben somit die **Eulersche Differentialgleichung** gefunden:

Falls  $y_0$  das Funktional  $F$  extremalisiert, so gilt

$$\frac{d}{dx} \left( \frac{\partial f}{\partial y'} \right) - \frac{\partial f}{\partial y} = 0 \tag{1.27}$$

bei  $y = y_0$  für alle  $x \in [0, 1]$ .

Um uns klarzumachen, dass wir es oben wirklich mit einer Differentialgleichung für  $y(x)$  zu tun haben, betrachten wir das einfache Beispiel  $f(y, y', x) = y^2 + y'^2$ . Dann hat die Eulersche Differentialgleichung die Form

$$\frac{d}{dx}(2y') - 2y = 0 \quad , \quad \text{das heißt} \quad y'' - y = 0. \tag{1.28}$$

Bitte beachten Sie, dass wir beim partiellen Ableiten von  $f$  definitionsgemäß  $y$  und  $y'$  als unabhängige Variable auffassen müssen. Die Tatsache, dass  $y'(x)$  die Ableitung der Funktion  $y$  and der Stelle  $x$  darstellt, ist in diesem Schritt irrelevant.

## 1.5 Das Hamiltonsche Prinzip (Prinzip der kleinsten Wirkung)

Wir können die Lage einer sehr großen Klasse von mechanischen Systemen durch sogenannte **verallgemeinerte Koordinaten**

$$(q_1, \dots, q_s) \tag{1.29}$$

beschreiben. Man nennt  $s$  auch die **Zahl der Freiheitsgrade**. Beispiele dazu sind:

- $N$  Massenpunkte:  $(q_1, \dots, q_s) \equiv (x_1^1, x_1^2, x_1^3, x_2^1, x_2^2, \dots, x_N^3)$  also  $s = 3N$
- Ein Massenpunkt in Kugelkoordinaten:  $(q_1, q_2, q_3) = (r, \theta, \varphi)$
- Eine dünne Stange:  $(q_1, \dots, q_5) = (x^1, x^2, x^3, \theta, \varphi)$   
 [Hier beschreiben  $(x^1, x^2, x^3)$  die Position des Schwerpunktes und  $(\theta, \varphi)$  die Ausrichtung im Raum.]
- Ein Rad auf einer Welle:  $q_1 = \varphi$

- Eine Perle auf einem Draht:  $q_1 = s$  (Bogenlänge entlang des Drahtes)

Das **Hamiltonsche Prinzip** besagt nun:

Für jedes<sup>2</sup> mechanische System mit  $s$  Freiheitsgraden existiert eine Funktion, die **Lagrange-Funktion**,

$$L = L(q_1, \dots, q_s, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_s, t) \quad (\text{in Kurzschreibweise: } L = L(q, \dot{q}, t)) \quad (1.30)$$

so dass gilt: Die physikalische Bewegung aus einer Lage  $q = q^{(1)}$  bei  $t = t_1$  in eine Lage  $q = q^{(2)}$  bei  $t = t_2$  verläuft so, dass das **Wirkungsfunktional**

$$S[q] = \int_{t_1}^{t_2} dt L(q, \dot{q}, t) \quad (1.31)$$

extremal (besser: **stationär**) wird.

Wir geben dazu eine Reihe von Anmerkungen oder Kommentaren:

Die Bezeichnung **Wirkung** geht darauf zurück, dass  $L$  die Dimension einer Energie hat. Das Produkt aus Energie und Zeit wird als Wirkung bezeichnet.

Für kleine Bahnabschnitte gilt nicht nur Stationarität sondern sogar Minimalität. Uns wird dies jedoch nicht interessieren, da es uns primär um die aus der Stationaritätsbedingung folgende Differentialgleichung gehen wird. Für uns sind also Minima, Sattelpunkte und Maxima gleich gut (wobei letztere jedoch nicht vorkommen), siehe auch [4, 5].

Die Bedeutung der eben eingeführten **Wirkung** lässt sich kaum überschätzen: Sie beherrscht und vereinfacht spezielle und allgemeine Relativitätstheorie, Feldtheorie, Stringtheorie und die Quantisierung all dieser Theorien.

Für **einen** Freiheitsgrad ( $s = 1$ ) wissen wir somit bereits: Das Hamilton-Prinzip impliziert die Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0, \quad (1.32)$$

welche man in diesem Zusammenhang auch **Euler-Lagrange-Gleichung** oder **Lagrange-Gleichung der zweiten Art** nennt.

Unsere obige Herleitung lässt sich leicht verallgemeinern und gibt für  $s > 1$ :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad (1.33)$$

für  $i = 1, \dots, s$ , also  $s$  Differentialgleichungen zweiter Ordnung. Mann spricht dann von **Euler-Lagrange-Gleichungen**.

## 1.6 Die Form der Lagrange-Funktion und erste Anwendungen

Als fundamentaler (experimenteller) Fakt gilt:

$$L = T - V, \quad (1.34)$$

---

<sup>2</sup>in einer gewissen, sehr großen Klasse...

wobei  $T$  die kinetische und  $V$  die potentielle Energie bezeichnen.

Da  $L$  beziehungsweise  $S$  als fundamentale Größe der Dynamik aufzufassen sind, bedarf diese Form keiner Herleitung (höchstens einer Begründung aus Symmetrieprinzipien, zu der wir noch kommen werden).

Trotzdem existiert natürlich eine Herleitung ‘aus Newton’ (siehe später), da die Newtonsche Beschreibung historisch der Lagrangeschen vorausgeht.

### 1.6.1 Massenpunkt im Potential

Wir haben

$$L(\bar{x}, \dot{\bar{x}}, t) = \frac{m}{2} \dot{\bar{x}}^2 - V(x). \quad (1.35)$$

Aus

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{x}^i} L - \frac{\partial}{\partial x^i} L = 0 \quad (1.36)$$

folgt somit

$$\frac{d}{dt} m \dot{x}^i + \frac{\partial V}{\partial x^i} = 0 \quad \Rightarrow \quad m \ddot{x}^i - F^i = 0 \quad \Rightarrow \quad m \ddot{\bar{x}} = \bar{F}, \quad (1.37)$$

wie erwartet.

### 1.6.2 System wechselwirkender Massenpunkte

Jetzt haben wir

$$T = \sum_a T_a = \sum_a \frac{m_a}{2} \dot{\bar{x}}_a^2, \quad V = \sum_{a>b} V_{ab}(|\bar{x}_a - \bar{x}_b|) \quad (1.38)$$

und wieder  $L = T - V$ . Die Euler-Lagrange-Gleichung für die Koordinate  $x_a^i$  lautet demnach

$$m_a \ddot{x}_a^i + \frac{\partial}{\partial x_a^i} \left( \sum_b V_{ab}(|\bar{x}_a - \bar{x}_b|) \right) = 0. \quad (1.39)$$

Die drei Gleichungen für  $i = 1, 2, 3$  lassen sich zu dem vertrauten Ergebnis

$$m_a \ddot{\bar{x}}_a = \bar{F}_a \quad \text{mit} \quad \bar{F}_a = \sum_b \bar{F}_{ab} = -\bar{\nabla}_a \sum_b V_{ab}(|\bar{x}_a - \bar{x}_b|) \quad (1.40)$$

zusammenfassen.

### 1.6.3 Perle auf einem Draht

Der Draht sei beschrieben durch die vektorwertige Funktion  $\bar{x}(s)$ , wobei  $s$  die Bogenlänge bezeichnet. Wir haben dann

$$L = \frac{m}{2} v^2 - V(\bar{x}(s)) = \frac{m}{2} \dot{s}^2 - V(\bar{x}(s)), \quad (1.41)$$

woraus sich sofort

$$m \ddot{s} - \frac{d}{ds} \left( -V(\bar{x}(s)) \right) \quad \text{bzw.} \quad m \ddot{s} - (-\bar{\nabla}V) \cdot \frac{d\bar{x}}{ds} = 0 \quad (1.42)$$

ergibt. Im letzten Term erkennen wir die Projektion der Kraft  $(-\bar{\nabla}V)$  auf die Drahrichtung, da  $(d\bar{x}/ds)$  bekanntermaßen der Einheitsvektor in Drahrichtung ist.

### 1.6.4 (Mathematisches) Pendel im Fahrstuhl

Wie in Abb. 3 dargestellt, sei das Pendel an der Decke des mit  $a$  nach oben beschleunigten Fahrstuhls aufgehängt. Das Pendel schwinge in der  $x$ - $y$ -Ebene und, wenn der Fahrstuhl bei  $t = 0$  ruht, haben wir  $v_y^F \equiv v_2^F = a \cdot t$ . Damit finden wir

$$L = \frac{m}{2} \bar{v}^2 - V \quad \text{mit} \quad \bar{v} = \left( \frac{d}{dt}(l \cdot \sin(\varphi)), a \cdot t - \frac{d}{dt}(l \cdot \cos(\varphi)) \right) \quad (1.43)$$

und

$$V = m \cdot g \cdot \left( \frac{a}{2} t^2 - l \cdot \cos(\varphi) \right) . \quad (1.44)$$

Sehr kompakt geschrieben lautet nun die Euler-Lagrange-Gleichung

$$0 = \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{\varphi}} - \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \left( \frac{m}{2} \bar{v}^2 - V \right) , \quad (1.45)$$

wobei wir natürlich die versteckte Abhängigkeit von  $\varphi$  beachten müssen:

$$\left( \frac{m}{2} \bar{v}^2 - V \right) = \frac{m}{2} \cdot [l^2 \cos^2(\varphi) \dot{\varphi}^2 + (a \cdot t + l \cdot \sin(\varphi) \dot{\varphi})^2] - m \cdot g \cdot \left( \frac{a}{2} t^2 - l \cdot \cos(\varphi) \right) . \quad (1.46)$$

Eine kurze Rechnung liefert

$$0 = \frac{d}{dt} \left( \frac{m}{2} (l^2 \cdot 2 \cdot \dot{\varphi} + 2a \cdot t \cdot l \sin(\varphi)) \right) - \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \frac{m}{2} \cdot 2a \cdot t \cdot l \cdot \dot{\varphi} \sin(\varphi) + m \cdot g \cdot l \cos(\varphi) \right) \quad (1.47)$$

$$0 = m \cdot l^2 \ddot{\varphi} + m \cdot a \cdot l \sin(\varphi) + ma \cdot l \cdot t \cos(\varphi) \cdot \dot{\varphi} - ma \cdot l \cdot t \cdot \dot{\varphi} \cos(\varphi) + mg \cdot l \sin(\varphi) ,$$

und schließlich

$$m \cdot l \cdot \ddot{\varphi} = -m \cdot (g + a) \sin(\varphi) . \quad (1.48)$$

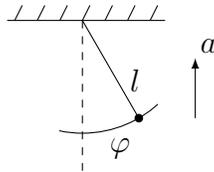


Abbildung 3: Mathematisches Pendel im Fahrstuhl.

Offensichtlich lässt sich der vom Aufhängepunkt ausgehende sogenannte **Zwang** (selbst mit Zeitabhängigkeit!) mittels Lagrange leicht berücksichtigen. Analog ist auch ein aus anderen Gründen zeitabhängiges  $V$  (zum Beispiel ein zeitabhängiges  $E$ -Feld etc.) für den Lagrange-Formalismus kein Problem.

## 1.7 Vereinfachte Herleitung der Lagrange-Gleichungen

Sei  $\delta q(t)$  eine Variation der Trajektorie  $q(t)$ . Mit anderen Worten, wir starten mit einer Trajektorie  $q(t)$  und verändern diese geringfügig, so dass die neue Trajektorie  $q(t) + \delta q(t)$  ist. Dies impliziert natürlich eine Veränderung von  $S$ . Wir nennen die neue Wirkung  $S + \delta S$ , bzw. wir definieren  $\delta S$  als Differenz von alter und neuer Wirkung.

Stationarität von  $S$  bedeutet:

$$0 = \delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \delta L(q, \dot{q}, t) = \int_{t_1}^{t_2} dt \left[ \frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \right] \quad (1.49)$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} dt \left[ \frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{d}{dt}(\delta q) \right]. \quad (1.50)$$

Partielle Integration unter Ausnutzung von  $\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$  liefert nun

$$0 = \int_{t_1}^{t_2} dt \left[ \frac{\partial L}{\partial q} \delta q - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q \right] = \int_{t_1}^{t_2} dt \left( \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \right) \delta q. \quad (1.51)$$

Da  $\delta q(t)$  jedoch beliebig war, muss  $\left( \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \right)$  verschwinden. Das ist natürlich, was wir erwartet haben.

## 1.8 Kommentare

### Argumente von $L$

Wir lassen nicht zu, dass  $\ddot{q}$ ,  $\ddot{q}$  etc. in  $L$  vorkommen, weil die Bewegungsgleichungen dann  $\ddot{q}$ ,  $\ddot{q}$  etc. enthalten würden. Dann reichen unsere gewohnten Anfangsbedingungen  $x(t_0)$  und  $v(t_0)$  nicht mehr zur Lösung des Anfangswertproblems.

Ein tieferer, theoretischer Grund dafür, dass physikalische Systeme typischerweise nicht durch Lagrange-Funktionen mit zweiten und höheren Ableitungen beschrieben werden, ist die Ostrogradsky-Instabilität. Grob gesagt gibt es dann keinen Grundzustand, von dem sich das System bei kleinen Auslenkungen nur geringfügig entfernt. Details finden sich z.B. in [6].

### Totale Zeitableitungen

Seien  $L$  und  $L'$  zwei Lagrange-Funktionen und

$$L' = L + \frac{d}{dt} f(q, t). \quad (1.52)$$

Wie oben bemerkt, darf  $f$  nur von  $q$ , nicht von  $\dot{q}$ , abhängen. Für die entsprechenden Wirkungen gilt

$$S' = S + \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{d}{dt} f(q, t) = S + [f(q(t_2), t_2) - f(q(t_1), t_1)], \quad (1.53)$$

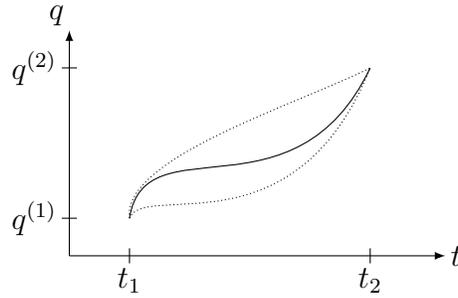


Abbildung 4: Verschiedene Trajektorien, die von  $q^{(1)}$  bei  $t_1$  nach  $q^{(2)}$  bei  $t_2$  führen.

wobei der Ausdruck in Klammern sich im Falle einer Variation  $\delta q$  offensichtlich nicht ändert. Also gilt

$$\delta S' = \delta S, \quad (1.54)$$

so dass  $L'$  physikalisch gleichwertig mit  $L$  ist. Anders gesagt ist  $L$  nur bis auf eine totale Zeitableitung definiert.

### Bedeutung von $S$ in der Quantenmechanik

Wir können an dieser Stelle einen (natürlich sehr qualitativen) Ausblick auf die Quantenmechanik geben: In der Quantenmechanik ist die Wahrscheinlichkeit für den Übergang eines Systems von  $(q^{(1)}, t_1)$  nach  $(q^{(2)}, t_2)$  durch

$$w \sim |A|^2 \quad (1.55)$$

gegeben, wobei  $A \in \mathbb{C}$  die sogenannte **Amplitude** ist. Letztere kann als

$$A \sim \int Dq \cdot e^{i \cdot S[q]/\hbar} \quad (1.56)$$

berechnet werden. Das Symbol  $\int Dq$  steht für die Summe über alle möglichen Wege von  $q^{(1)}$  bei  $t_1$  nach  $q^{(2)}$  bei  $t_2$  und wird auch als **Pfadintegral** bezeichnet, vgl. Abb. 4. Die Konstante  $\hbar = 2\pi\hbar$  wird als **Plancksches Wirkungsquantum** bezeichnet.

Es gibt verschiedene denkbare Trajektorien (verschiedene Funktionen  $q(t)$ ). Der klassische Weg ist nur einer davon. Im Limes  $\hbar \rightarrow 0$  dominiert der klassische Weg in dem Integral, welches  $A$  definiert. Der Grund ist, dass sich  $S$  wegen der Stationarität in der Nähe des klassischen Weges kaum ändert. Alle anderen Integrationsbereiche tragen wegen der sehr schnellen Oszillation von  $e^{i \cdot S}$  im Limes  $\hbar \rightarrow 0$  nicht bei: Die sich schnell verändernde Phase führt in der Summe zur gegenseitigen Auslöschung der Beiträge.

## 2 Symmetrien und Erhaltungssätze

Das zentrale Ziel dieses Kapitels ist das **Noether-Theorem**: Zu jeder kontinuierlichen Symmetrie eines physikalischen Systems gehört eine Erhaltungsgröße (Emmy Noether, 1918). Wir

kennen bereits die relevanten Symmetrien und auch die Erhaltungsgrößen aber noch nicht deren Zusammenhang.

Ebenso wichtig ist die Tatsache, dass man in der modernen Physik die Symmetrien eines Systems als primär betrachtet. Im Idealfall folgt die Wirkung eindeutig aus den geforderten oder gegebenen Symmetrien.

Kurz gesagt gilt also

$$\text{Symmetrien} \Rightarrow \text{Form der Wirkung} \quad (2.1)$$

sowie

$$\text{Wirkung hat eine gewisse Symmetrie} \Rightarrow \text{Erhaltungsgröße} . \quad (2.2)$$

## 2.1 Symmetriemotivation der Wirkung

### 2.1.1 Freier Massenpunkt

Wegen der Homogenität von Raum und Zeit haben wir zunächst

$$L(\bar{x}, \bar{v}, t) = L(\bar{v}) \quad (2.3)$$

sowie, wegen der Isotropie des Raumes,

$$L(\bar{v}) = L(\bar{v}^2) . \quad (2.4)$$

Diese im Moment noch allgemeine Funktion von  $\bar{v}^2$  lässt sich weiter einschränken, wenn wir (kleine) Galilei-Boosts  $\bar{v} \rightarrow \bar{v}' = \bar{v} + \bar{\varepsilon}$  betrachten:

$$L(\bar{v}^2) \rightarrow L(\bar{v}'^2) = L(\bar{v}^2 + 2\bar{v} \cdot \bar{\varepsilon} + \bar{\varepsilon}^2) = L(\bar{v}^2) + \frac{\partial L(\bar{v}^2)}{\partial(\bar{v}^2)} \cdot (2\bar{v} \cdot \bar{\varepsilon}) + O(\bar{\varepsilon}^2) . \quad (2.5)$$

Damit dies eine Symmetrie ist, wollen wir, wie oben erklärt, fordern, dass sich  $L$  nur um eine totale Ableitung ändert. Wir verlangen also

$$\frac{\partial L(\bar{v}^2)}{\partial(\bar{v}^2)} \cdot (2\bar{v} \cdot \bar{\varepsilon}) = \frac{d}{dt} \left\{ f(\bar{v}, \bar{x}) \right\} . \quad (2.6)$$

Damit die explizite  $\bar{x}$ -Anhängigkeit nach dem Ableiten verschwindet, darf  $f$  höchstens linear von  $\bar{x}$  abhängen. Von  $\bar{v}$  darf  $f$  gar nicht abhängen, sonst würde sich ein Beitrag mit  $\dot{\bar{v}}$  ergeben. Man schließt sofort, dass

$$f(\bar{v}, \bar{x}) = \text{const.} \times (2\bar{x} \cdot \bar{\varepsilon}) \quad (2.7)$$

und demnach

$$\frac{\partial L(\bar{v}^2)}{\partial(\bar{v}^2)} (2\bar{v} \cdot \bar{\varepsilon}) = \frac{d}{dt} \left\{ \text{const.} \times (2\bar{x} \cdot \bar{\varepsilon}) \right\} = \text{const.} \times (2\bar{v} \cdot \bar{\varepsilon}) . \quad (2.8)$$

Wir sehen, dass  $\partial L / \partial \bar{v}^2$  eine Konstante ist und geben dieser den Namen  $m/2$ . Damit folgt

$$L = \frac{m}{2} \bar{v}^2 , \quad (2.9)$$

wobei das Vorzeichen positiv sein muss, damit  $S$  ein Minimum hat (was natürlich nur eine Konvention ist).

### 2.1.2 Mehrere Massenpunkte

Wenn wir mehrere unabhängige Systeme gleichzeitig betrachten, so können wir die jeweiligen Lagrange-Funktionen schlicht addieren:

$$L(q_1, q_2, \dot{q}_1, \dot{q}_2, t) = L_1(q_1, \dot{q}_1, t) + L_2(q_2, \dot{q}_2, t). \quad (2.10)$$

Rechnen Sie dazu nach, dass die Anwendung der Operatoren

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial}{\partial q_i} \quad \text{mit} \quad i = 1, 2 \quad (2.11)$$

auf  $L$  (was die beiden Lagrange-Gleichungen gibt) äquivalent zur getrennten Anwendung des ersten Operators auf  $L_1$  und des zweiten auf  $L_2$  ist.  $L$  liefert also die selben Bewegungsgleichungen wie  $L_1$  und  $L_2$  getrennt. Diese Additivität gilt auch dann, wenn jedes Teilsystem mehrere Freiheitsgrade hat.

Im Fall mehrerer freier Massenpunkte gilt demnach

$$L = \sum_a \frac{m_a}{2} \bar{v}_a^2. \quad (2.12)$$

Wir haben also  $L = T$  mit  $T$  der kinetischen Energie, aber letzteres ist im Moment nur ein Name.

Hinzunahme von Wechselwirkungen der Form

$$V = \sum_{a < b} V_{ab}(|\bar{x}_a - \bar{x}_b|) \quad (2.13)$$

respektiert die Galilei-Invarianz, weil  $|\bar{x}_a - \bar{x}_b|$  invariant ist. Folglich ist

$$L = T - V \quad (2.14)$$

ein plausibler und für viele Anwendungen ausreichend allgemeiner Ansatz. Das negative Vorzeichen ist nur Konvention und  $V$  als potentielle Energie zu bezeichnen ist im Moment wieder nur die Wahl eines Namens (letzteres wird sich bald ändern).

All das stellt keinen Beweis dar, dass  $L = T - V$  die ‘richtige’ Lagrange-Funktion ist, sondern ist lediglich eine Motivation. Trotzdem gehören derartige Symmetrieargumente bei der Suche nach den fundamentalen physikalischen Gesetzen zu den wichtigsten Methoden.

## 2.2 Energieerhaltung

Der anschaulichen Begriff der Homogenität der Zeit spiegelt sich in der Zeittranslationsinvarianz der Naturgesetze wider. Dies bedeutet Invarianz (Symmetrie) unter  $t \rightarrow t + \epsilon$  und wird im Lagrange-Formalismus dadurch implementiert, dass  $L$  nicht explizit von  $t$  abhängt:

$$L(q, \dot{q}, t) = L(q, \dot{q}). \quad (2.15)$$

Wir hatten dieses Argument oben bereits im speziellen Fall des freien Massenpunktes verwendet.

Da nun  $t$  nur indirekt, über  $q$  und  $\dot{q}$ , Eingang in  $L$  findet, gilt:

$$\frac{d}{dt}L = \frac{\partial L}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i = \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{d}{dt} \dot{q}_i = \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i \right). \quad (2.16)$$

Hier ist die Summation über  $i$  implizit und wir haben im zweiten Schritt die Euler-Lagrange-Gleichungen in der Form

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (2.17)$$

benutzt.

Aus (2.16) folgt

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i - L \right) = 0, \quad (2.18)$$

und damit die **Energieerhaltung**:

**Hängt die Lagrange-Funktion nicht explizit von der Zeit  $t$  ab, so ist**

$$E \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i - L \quad \text{erhalten:} \quad \frac{d}{dt} E = 0. \quad (2.19)$$

Es bleibt zu zeigen, dass das so definierte  $E$  wirklich die Energie ist. Dazu betrachten wir:

## 2.3 Homogene Funktionen und Satz von Euler (M)

Eine Funktion  $f$  von  $n$  Variablen heißt homogen vom Grad  $k$ , falls

$$f(\alpha \cdot x_1, \dots, \alpha \cdot x_n) = \alpha^k \cdot f(x_1, \dots, x_n). \quad (2.20)$$

Zwei einfache Beispiele sind:

$$f(x) = x^p \quad \text{ist homogen vom Grad} \quad k = p \quad (2.21)$$

und

$$f(x, y, z) = \frac{x}{y \cdot z} + \frac{1}{x} \cdot \cos\left(\frac{x}{z}\right) \quad \text{ist homogen vom Grad} \quad k = -1. \quad (2.22)$$

Ein für uns besonders wichtiges Beispiel ist

$$T(q_1, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n) = \frac{1}{2} f_{ij}(q) \cdot \dot{q}_i \dot{q}_j \quad (2.23)$$

mit impliziter Summation über  $i$ . Diese Funktion ist homogen vom Grad  $k = 2$ , aber nur bezüglich der  $\dot{q}_i$ 's.

Der **Satz von Euler** besagt nun:

$$f(x_1, \dots, x_n) \text{ ist homogen vom Grad } k \quad \Rightarrow \quad \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} \cdot x_i = k \cdot f. \quad (2.24)$$

Zur Begründung berechnen wir die Ableitung der Homogenitätsaussage nach  $\alpha$ :

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} f(\alpha \cdot x_1, \dots, \alpha \cdot x_n) = \frac{\partial}{\partial \alpha} (\alpha^k \cdot f(x_1, \dots, x_n)). \quad (2.25)$$

Daraus folgt

$$\sum_i \frac{\partial f(\alpha \cdot x_1, \dots, \alpha \cdot x_n)}{\partial(\alpha x_i)} \cdot \frac{\partial(\alpha x_i)}{\partial \alpha} = k \cdot \alpha^{k-1} \cdot f(x_1, \dots, x_n) \quad (2.26)$$

bzw.

$$\sum_i \frac{\partial f(\alpha \cdot x_1, \dots, \alpha \cdot x_n)}{\partial(\alpha x_i)} \cdot x_i = k \cdot \alpha^{k-1} \cdot f(x_1, \dots, x_n). \quad (2.27)$$

Setzen wir nun  $\alpha = 1$ , so folgt die Behauptung.

## Energieerhaltung (Fortsetzung)

Wir nehmen an, dass  $L$  die folgende Form hat:

$$L = T - V = \frac{1}{2} f_{ij}(q) \cdot \dot{q}_i \dot{q}_j - V(q). \quad (2.28)$$

Zur Begründung bemerken wir im Moment nur, dass sich diese Form typischerweise ergibt, wenn man  $\sum_a \frac{m_a}{2} \bar{v}_a^2$  in verallgemeinerten Koordinaten umschreibt. Wir werden das in vielen Beispielen sehen.

Mit der obigen Annahme gilt

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i = 2T, \quad (2.29)$$

wobei wir im letzten Schritt den Satz von Euler benutzt haben. Natürlich können wir das auch ohne Satz von Euler explizit nachrechnen:

$$\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i = \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} \left( \frac{1}{2} f_{jk} \dot{q}_j \dot{q}_k \right) \dot{q}_i = \frac{1}{2} f_{jk} \delta_{ij} \dot{q}_k \dot{q}_i + \frac{1}{2} f_{jk} \dot{q}_j \delta_{ik} \dot{q}_i = f_{ik} \dot{q}_i \dot{q}_k = 2T. \quad (2.30)$$

Es folgt somit

$$E \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i - L = 2T - (T - V) = T + V, \quad (2.31)$$

wie erhofft.

Zusammenfassend sehen wir also: Unter der Annahme, dass  $L = T - V$ , wobei  $T$  homogen vom Grad 2 in den verallgemeinerten Geschwindigkeiten ist, finden wir, dass  $E = T + V$  erhalten ist.

Eigentlich ist das aber nur die historische Logik. Die moderne Sichtweise ist, dass die Energie per Definition die Erhaltungsgröße ist, welche aus Zeittranslationsinvarianz folgt.

## 2.4 Erhaltung der verallgemeinerten Impulse

In einem durch  $q_1, \dots, q_s$  parametrisierten System, bezeichnet man die Größen

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (2.32)$$

als **verallgemeinerte Impulse**. Dies ist die natürliche Verallgemeinerung der vertrauten Situation

$$L = \sum_{i=1}^3 \frac{m}{2} \dot{x}_i^2 \quad \text{mit} \quad p_i = m\dot{x}_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}. \quad (2.33)$$

Ein Koordinate heißt **zyklisch**, falls sie *nicht* explizit in  $L$  vorkommt. Ihre Ableitung darf vorkommen. Zum Beispiel ist in einem System, dessen Lage durch  $q_1, \dots, q_s$  parametrisiert ist und welches

$$L = L(q_2, \dots, q_s, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_s, t) \quad (2.34)$$

hat,  $q_1$  eine zyklische Koordinate. Somit ist die Transformation  $q_1 \rightarrow q'_1 = q_1 + \varepsilon$  eine Symmetrie. Wegen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1} - \frac{\partial L}{\partial q_1} = 0 \quad \text{und (per Annahme)} \quad \frac{\partial L}{\partial q_1} = 0 \quad (2.35)$$

ist also  $p_1 = \partial L / \partial \dot{q}_1$  erhalten:

$$\frac{d}{dt} p_1 = 0. \quad (2.36)$$

Wir sehen, dass ganz allgemein **die verallgemeinerten Impulse zyklischer Koordinaten erhalten sind**.

Ein einfaches aber wichtiges Beispiel ist ein Massenpunkt in einem Potential, welches nicht von  $x_1$  abhängt. In diesem Fall ist  $p_1$  erhalten. Dies ist vom schrägen Wurf wohlbekannt, da hier  $V = mg \cdot x_3$  und  $p_1, p_2$  erhalten sind.

Ein weiteres Beispiel ist ein Massenpunkt in einer Ebene im Zentralpotential:

$$L = \frac{m}{2} (r^2 \dot{\varphi}^2 + \dot{r}^2) - V(r). \quad (2.37)$$

Hierbei ist  $\varphi$  zyklisch und somit

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2 \cdot \dot{\varphi} \quad (2.38)$$

erhalten. Dies ist der Betrag des Drehimpulses.<sup>3</sup>

Das letzte Beispiel erklärt auch den Namen ‘zyklisch’: In Systemen, welche sich nur in einem endlichen Bereich bewegen, ist der obige Fall der (periodischen) Winkelvariable typisch für eine zyklische Koordinate.

---

<sup>3</sup>Die Rechnung lässt sich auch zur (gewohnten) 3-dimensionalen Drehimpulserhaltung eines Punktmassensystems erweitern. Man kann direkt die Invarianz von  $L$  unter  $\vec{x}_a \rightarrow \vec{x}'_a = R \cdot \vec{x}_a$  (für alle  $a$  gleichzeitig) fordern und  $\vec{L} = \vec{x}_a \times \vec{p}_a = \text{const.}$  zeigen. Siehe Seite 68 des auf der TPI-Webseite verlinkten Skriptes von 2005.

## 2.5 Noether-Theorem

Wir starten mit dem Begriff einer **kontinuierlichen Symmetrie**. Dazu brauchen wir zunächst eine Transformation

$$q(t) \rightarrow q'(t) = q(t) + \delta q(t) \equiv q(t) + \varepsilon \cdot \chi(t) \quad (2.39)$$

mit  $\varepsilon \in \mathbb{R}$ , so dass der Grenzwert  $\varepsilon \rightarrow 0$  gebildet werden kann. Damit die Bewegungsgleichungen invariant sind, fordern wir nun

$$\delta L \equiv L(q + \delta q, \dot{q} + \delta \dot{q}, t) - L(q, \dot{q}, t) \stackrel{!}{=} \varepsilon \cdot \frac{d}{dt} f. \quad (2.40)$$

Damit haben wir definiert, was wir unter einer kontinuierlichen Symmetrie verstehen.

Lassen Sie uns zunächst diskutieren, warum eine solche Transformation eine Symmetrie ist. Oberflächlich betrachtet scheint dies klar, weil wir schon gelernt haben, dass das Hinzufügen von einer Funktion der Form  $(d/dt)f(q, t)$  zu  $L$  eine neue Wirkung mit **unveränderten** Bewegungsgleichungen ergibt. Dies bleibt auch grundsätzlich die richtige Idee, aber die Details sind hier etwas komplizierter.<sup>4</sup> Zunächst hängt  $\chi$ , wie die Beispiele weiter unten zeigen werden, i.A. von  $q$  und  $\dot{q}$  ab. Wir finden also in (2.40)  $f = f(q, \dot{q}, t)$ . Die Wirkung der transformierten Funktion  $q + \varepsilon\chi(q, \dot{q}, t)$  ist demnach

$$S[q + \varepsilon\chi(q, \dot{q}, t)] = S[q] + \varepsilon \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt} f(q, \dot{q}, t) = S[q] + \varepsilon f(q, \dot{q}, t) \Big|_{t_1}^{t_2}. \quad (2.41)$$

Nun wollen wir annehmen, dass  $q$  nicht nur eine beliebige Funktion sondern speziell eine **Lösung**, also eine physikalische Bewegung, ist. Dies bedeutet insbesondere, dass  $S[q]$  extremal ist. Wir wollen prüfen, ob  $S[q + \varepsilon\chi(q, \dot{q}, t)]$  auch extremal ist. Dazu variieren wir gemäß

$$q + \varepsilon\chi \rightarrow q + \underline{\delta}q + \varepsilon\chi(q + \underline{\delta}q, \dot{q} + \underline{\delta}\dot{q}, t). \quad (2.42)$$

Der ‘Unterstrich’ soll uns daran erinnern, dass es sich hier um eine Variation im Sinne der Herleitung der Euler-Lagrange-Gleichungen handelt, nicht um eine Transformation im Sinne von  $\delta q = \varepsilon\chi$ . Wir finden

$$\underline{\delta}S[q + \varepsilon\chi(q, \dot{q}, t)] = S[q + \underline{\delta}q] - S[q] + \varepsilon \left\{ f(q + \underline{\delta}q, \dot{q} + \underline{\delta}\dot{q}, t) - f(q, \dot{q}, t) \right\} \Big|_{t_1}^{t_2} = 0. \quad (2.43)$$

Das Ergebnis ist Null weil zum einen  $S[q]$  extremal war und wir zum anderen o.B.d.A. die Variation  $\underline{\delta}q$  so wählen können, dass sie zusammen mit ihrer ersten Ableitung bei  $t_{1,2}$  verschwindet. Damit wissen wir also, dass unsere Transformation eine Lösung wieder auf eine Lösung abbildet – dies ist genau, was wir von einer Symmetrie verlangen.

Jetzt folgt die Herleitung der Erhaltungsgröße. Wir schreiben

$$\varepsilon \cdot \frac{d}{dt} f = \delta L = \frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \quad (2.44)$$

---

<sup>4</sup> Der Rest dieses Absatzes ist kein Prüfungstoff.

und, unter Verwendung der Euler-Lagrange-Gleichung,

$$\varepsilon \cdot \frac{d}{dt} f = \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{d}{dt} (\delta q) = \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right). \quad (2.45)$$

Also gilt

$$0 = \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q - \varepsilon \cdot f \right) = \varepsilon \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \chi - f \right), \quad (2.46)$$

wobei wir  $\delta q = \varepsilon \cdot \chi$  benutzt haben. Da  $\varepsilon$  von Null verschieden ist, muss die totale Zeitableitung verschwinden. Diese Herleitung lässt sich ohne weiteres auf den Fall vieler Koordinaten verallgemeinern und gibt dann das

### Noether-Theorem:

Sei die Transformation mit  $\delta q_i = \varepsilon \cdot \chi_i$  eine Symmetrie (das heißt  $\delta L = \varepsilon \cdot \frac{d}{dt} f$ ), dann gilt:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \chi_i - f \right) = 0. \quad (2.47)$$

Der Ausdruck in Klammern ist die zur Symmetrie gehörende Erhaltungsgröße.

Wir geben zwei Beispiele:

Betrachten wir ein  $L$  ohne explizite Zeitabhängigkeit, so dass Zeittranslationsinvarianz gilt. Die entsprechende Transformation ist

$$q(t) \rightarrow q'(t) = q(t + \varepsilon) = q(t) + \dot{q}(t) \cdot \varepsilon + O(\varepsilon^2), \quad (2.48)$$

so dass

$$\delta q = \dot{q} \cdot \varepsilon \equiv \varepsilon \chi \quad \text{bzw.} \quad \chi = \dot{q}. \quad (2.49)$$

Jetzt berechnen wir  $\delta L$ :

$$\delta L = \frac{\partial L}{\partial q} \cdot \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} = \varepsilon \frac{\partial L}{\partial q} \dot{q} + \varepsilon \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \ddot{q} = \varepsilon \left( \frac{\partial L}{\partial q} \cdot \frac{dq}{dt} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{d\dot{q}}{dt} \right) = \varepsilon \cdot \frac{d}{dt} L. \quad (2.50)$$

Damit haben wir gefunden, dass  $f = L$  gilt und unsere Erhaltungsgröße ist

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \chi - f = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} - L = E, \quad (2.51)$$

wie erwartet.

**Achtung:** Bei der Berechnung einer konkreten Erhaltungsgröße aus einer gegebenen Symmetrie darf die Bewegungsgleichung **nicht** benutzt werden. In der Tat, wenn wir im vorletzten Ausdruck von (2.50) die Ersetzung

$$\frac{\partial L}{\partial q} \rightarrow \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \quad (2.52)$$

durchgeführt hätten, dann hätten wir statt  $f = L$

$$f = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} \quad (2.53)$$

gefunden. Damit wäre die Erhaltungsgröße am Ende identisch Null und wir hätten nichts gelernt. Dies ist aber auch nicht erstaunlich, da die Variation von  $S$  um eine Lösung per Hamilton-Prinzip immer Null ist - auch ohne Symmetrie. Also, zusammenfassend: Bei der Erhaltungsgrößen-Berechnung nach dem Schema (2.48) – (2.51) darf **nicht** angenommen werden, dass  $q(t)$  eine Lösung ist. In dieser Rechnung ist  $q(t)$  schlicht eine beliebige Funktion.

Als zweites Beispiel betrachten wir die Verschiebung einer zyklische Koordinate. Es gilt

$$q' = q + \varepsilon \Rightarrow \chi = 1 \quad \text{sowie} \quad \delta L = 0 \Rightarrow f = 0. \quad (2.54)$$

Die Erhaltungsgröße ist

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \chi - f = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \cdot 1 - 0 = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = p. \quad (2.55)$$

Wir haben also, wiederum wie erwartet, den verallgemeinerten Impuls erhalten.

Wir schließen mit einer Zusammenstellung der zu den Galilei-Transformation gehörenden Erhaltungsgrößen:

Symmetrie	Erhaltungsgröße
Zeittranslation	Energie
Translationen	Impuls
Rotationen	Drehimpuls
Boosts	$\bar{x}_s - \bar{v}_s \cdot t$

Die Größe in der letzten Zeile ist eine Kombination von Schwerpunktskoordinate und -geschwindigkeit. Ihre Erhaltung,

$$\bar{x}_s - \bar{v}_s \cdot t = \text{const.}, \quad (2.56)$$

besagt, dass sich der Schwerpunkt geradlinig gleichförmig bewegt.

Bitte vergessen Sie das Noether-Theorem nicht – seine Bedeutung, z.B. in der (Quanten-)Feldtheorie, ist enorm.

## 2.6 Mechanische Ähnlichkeit

Betrachten wir ein System mit Lagrange-Funktion

$$L = \sum_a \frac{m_a}{2} \dot{\bar{x}}_a^2 - V(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_n) \quad (2.57)$$

und einem Potential  $V$ , welches eine homogene Funktion der  $x_a^i$  vom Grad  $k$  ist. Sei  $t \mapsto \{\bar{x}_a(t)\}$  eine physikalische Bewegung, also eine Lösung der Euler-Lagrange-Gleichungen. Wir wollen dafür verkürzt auch  $t \mapsto x(t)$  schreiben.

Wir betrachten nun die Transformation

$$x \rightarrow \alpha \cdot x, \quad t \rightarrow \beta \cdot t, \quad (2.58)$$

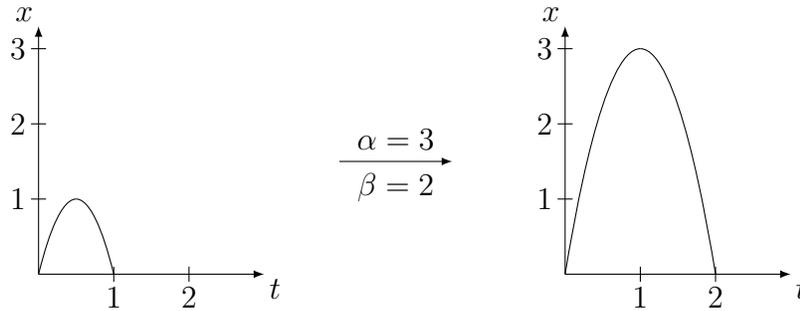


Abbildung 5: Zur mechanischen Ähnlichkeit.

wobei  $\alpha$  und  $\beta$  beliebige aber fest gewählte Konstanten sein sollen (Abb. 5).

Die Trajektorien sind demnach

$$\text{Alte Bewegung: } \{t \mapsto x(t)\} \quad \longrightarrow \quad \text{Neue Bewegung: } \{\beta t \mapsto \alpha \cdot x(t)\}. \quad (2.59)$$

Durch Variablenwechsel zu  $t' = \beta t$  und anschließende Umbenennung  $t' \rightarrow t$  haben wir auch

$$\text{Neue Bewegung: } \{t \mapsto \alpha \cdot x(t/\beta)\}. \quad (2.60)$$

Die kinetische und potentielle Energie transformieren sich dementsprechend:

$$T, V \quad \longrightarrow \quad \left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^2 \cdot T, \quad \alpha^k \cdot V. \quad (2.61)$$

Jetzt heben wir die Beliebigkeit von  $\alpha$  und  $\beta$  auf und fordern

$$\alpha^k = \left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^2. \quad (2.62)$$

Wenn dies erfüllt ist, dann folgt aus (2.61) das Transformationsverhalten  $L \rightarrow \alpha^k \cdot L$ . Nun bemerken wir, dass die Euler-Lagrange-Gleichung

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \quad (2.63)$$

homogen in  $L$ ,  $x$  und  $t$  ist (jeweils vom Grad 1,  $-1$  und  $0$ ). Falls also die alte Bewegung, wie angenommen, eine Lösung darstellt, und falls (2.62) gilt, so wird die neue Bewegung wieder eine Lösung und damit wieder eine *physikalische* Bewegung sein.

Diese Situation heißt **mechanische Ähnlichkeit**. Sie wird durch die Wahl  $\beta = \beta(\alpha) = \alpha^{1-k/2}$  (vg. (2.62)) realisiert. Die neue, transformierte Trajektorie beschreibt dadurch wieder eine physikalische Bewegung (löst also wieder die Euler-Lagrange-Gleichungen).

### Zur Anwendung:

Sei  $X$  eine **typische Länge** einer Bewegung (Bahnradius, Entfernung zum Umkehrpunkt,

etc.). Sei  $T$  eine **typische Zeit** einer Bewegung (Periode, Zeit zwischen zwei Umkehrpunkten, etc.). Seien  $X' = \alpha \cdot X$  und  $T' = \beta \cdot T$  die entsprechenden Größen der ähnlichen Bewegung. Dann gilt:

$$\frac{T'}{T} = \beta = \alpha^{1-k/2} = \left(\frac{X'}{X}\right)^{1-k/2}. \quad (2.64)$$

Die entscheidende, praktisch nützliche **Beziehung bei mechanischer Ähnlichkeit** lautet demnach

$$\frac{T'}{T} = \left(\frac{X'}{X}\right)^{1-k/2}. \quad (2.65)$$

Das illustrieren wir mit ein paar Beispielen:

**Harmonischer Oszillator:**

$$V \sim x^2 \quad \Rightarrow \quad k = 2 \quad \Rightarrow \quad \frac{T'}{T} = 1. \quad (2.66)$$

Die Periodendauer ist also unabhängig von der Auslenkung.

**Freier Fall:**

$$V \sim x \quad \Rightarrow \quad k = 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{T'}{T} = \sqrt{\frac{X'}{X}}. \quad (2.67)$$

Die Quadrate der Fallzeiten verhalten sich wie die Fallhöhen.

**Gravitation:**

$$V \sim \frac{1}{x} \quad \Rightarrow \quad k = -1 \quad \Rightarrow \quad \frac{T'}{T} = \left(\frac{X'}{X}\right)^{\frac{3}{2}}. \quad (2.68)$$

Die Quadrate der Umlaufzeiten verhalten sich wie die Kuben der Bahngrößen (3. Keplersches Gesetz).

## 2.7 Virialsatz

Eine interessante Konsequenz ergibt sich, wenn wir zeitgemittelte Größen betrachten:

$$\langle A \rangle \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t dt' A(t'). \quad (2.69)$$

Dies ist besonders einfach, falls  $A$  eine totale Zeitableitung ist. Um die mittlere kinetische Energie  $\langle T \rangle$  zu ermitteln, versuchen wir,  $T$  als totale Zeitableitung umzuschreiben (zur Einfachheit für einen Freiheitsgrad – die Verallgemeinerung ist einfach):

$$2T = mv^2 = p \cdot \dot{x} = \frac{d}{dt}(p \cdot x) - \dot{p} \cdot x = \frac{d}{dt}(p \cdot x) + x \cdot \frac{\partial V}{\partial x}. \quad (2.70)$$

Es folgt

$$\left\langle 2T - x \cdot \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle = \left\langle \frac{d}{dt}(p \cdot x) \right\rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t dt' \frac{d}{dt'}(px) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} (px|_t - px|_0) = 0. \quad (2.71)$$

wobei wir angenommen haben, dass  $p$  und  $x$  beschränkt bleiben.

Damit haben wir den **Virialsatz**: Für Bewegungen in einem beschränkten Gebiet mit beschränkten Geschwindigkeiten gilt

$$2 \cdot \langle T \rangle = \left\langle \sum_a \bar{x}_a \cdot \frac{\partial V}{\partial \bar{x}_a} \right\rangle. \quad (2.72)$$

Der Ausdruck auf der rechten Seite heißt **das Virial**. Detaillierter ausgeschrieben lautet er

$$\sum_{a=1}^N \sum_{i=1}^3 x_a^i \frac{\partial V}{\partial x_a^i}. \quad (2.73)$$

Falls  $V$  homogen vom Grad  $k$  ist, gilt demnach

$$2\langle T \rangle = k \cdot \langle V \rangle \quad (2.74)$$

Als hat man z.B. beim harmonischer Oszillator  $\langle T \rangle = \langle V \rangle$  und im Fall der Gravitation  $2\langle T \rangle = -\langle V \rangle$ . Diese Beziehung ist interessant für die Beschreibung der Bewegung von Sternen in einer Galaxie, wo man so einen Zusammenhang zwischen mittlerem Geschwindigkeitsquadrat der Sterne und Galaxienmasse ableiten kann.

### 3 Trägheitstensor

Wir wollen den Begriff des Trägheitstensor, welcher eine wichtige Eigenschaft starrer Körper ist, weiterentwickeln und vertiefen. Bitte erinnern Sie sich an die  $N$  durch ‘masselose starre Stangen’ verbundenen Massenpunkte als Modell des starren Körpers sowie an die kurzen Kapitel zur Drehimpulserhaltung und zum Trägheitstensor im letzten Semester.

#### 3.1 Trägheitsmoment und Satz von Steiner

Wie in Abb. 6 dargestellt, besteht unser Körper (nunmehr im Kontinuumslimites statt im Punktmassen-Modell) aus vielen Elementen mit Masse

$$m_a \simeq \rho \Delta V. \quad (3.1)$$

Wenn die einzige erlaubte Bewegung die Drehung um die Achse  $A$  ist, so gilt angenähert

$$T \simeq \sum_a \frac{m_a}{2} v_a^2 = \sum_a \frac{m_a}{2} \cdot \omega^2 \cdot r_{a,\perp}^2 = \frac{1}{2} I_A \cdot \omega^2 \quad (3.2)$$

mit dem **Trägheitsmoment bzgl. der Achse  $A$**

$$I_A \equiv \sum_a m_a r_{a,\perp}^2. \quad (3.3)$$

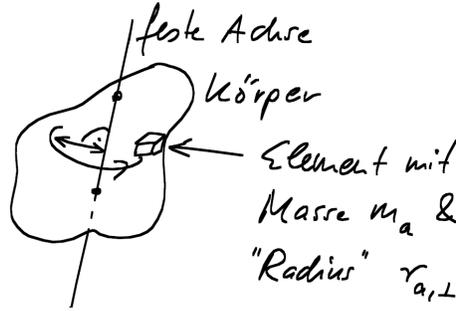


Abbildung 6: Rotation eines starren Körpers um eine feste Achse  $A$ . Der senkrechte Abstand des Elements  $a$  mit Masse  $m_a$  zur Achse  $A$  sei  $r_{a,\perp}$ .

Im Limes beliebig kleiner Volumenelemente erhält man

$$I_A \equiv \int d^3\bar{r} \rho(\bar{r}) r_{\perp}^2, \quad (3.4)$$

und der entsprechende Ausdruck für  $T$  wird exakt.

Der einzige Freiheitsgrad ist der Drehwinkel  $\varphi$ , wobei  $\omega \equiv \dot{\varphi}$ . Lagrangefunktion und Bewegungsgleichung sind also

$$L(\varphi, \dot{\varphi}) = \frac{1}{2} \cdot I_A \cdot \dot{\varphi}^2 - V(\varphi) \quad \Rightarrow \quad I_A \ddot{\varphi} = -\frac{dV(\varphi)}{d\varphi}, \quad (3.5)$$

wobei wir angenommen haben, dass die potentielle Energie jedes einzelnen Massenelements in einer vorgegebenen Weise vom Winkel abhängt:

$$V(\varphi) = \sum_a V_a(\bar{r}_a(\varphi)). \quad (3.6)$$

(Es ist für uns hier bequemer, bei der Summennotation zu bleiben statt zur Integralnotation zu wechseln. Es ist aber eine nützliche Aufgabe für den Leser, eine schräge Achse anzunehmen, so dass die Schwerkraft ein  $V$  erzeugt, und eine entsprechende, möglichst explizite Integralformel für  $V$  herzuleiten.)

Um die Bewegungsgleichung in (3.5) besser zu verstehen, brauchen wir  $dV/d\varphi$ . Dazu betrachten wir folgende Rechnung:

$$\begin{aligned} V(\varphi + \delta\varphi) &= \sum_a V_a(\bar{r}_a(\varphi) + \delta\bar{r}_a) = \sum_a V_a(\bar{r}_a(\varphi) + \delta\bar{\varphi} \times \bar{r}_a(\varphi)) \\ &= \sum_a V_a(\bar{r}_a(\varphi)) + \sum_a (\delta\bar{\varphi} \times \bar{r}_a) \cdot \bar{\nabla} V_a(\bar{r}_a(\varphi)). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Hier haben wir durch  $\delta\bar{\varphi}$  einen Vektor der Länge  $\delta\varphi$  in Achsenrichtung bezeichnet. Das Ergebnis können wir auch als

$$V(\varphi + \delta\varphi) - V(\varphi) = \sum_a (\delta\bar{\varphi} \times \bar{r}_a) \cdot \bar{\nabla} V_a(\bar{r}_a(\varphi)) \quad (3.8)$$

schreiben. Im Limes  $\delta\varphi \rightarrow 0$  folgt

$$-\frac{dV(\varphi)}{d\varphi} = -\sum_a \frac{(\delta\bar{\varphi} \times \bar{r}_a)}{|\delta\bar{\varphi}|} \cdot \nabla V_a(\bar{r}_a(\varphi)) = \sum_a \underbrace{\varepsilon^{ijk}}_{=\varepsilon^{jki}} (\bar{e}_A)^j (r_a)^k (F_a)^i = \bar{e}_A \cdot \sum_a (\bar{r}_a \times \bar{F}_a) . \quad (3.9)$$

Der Einheitsvektor in Achsenrichtung ist hier mit  $\bar{e}_A$  bezeichnet worden und wir erkennen im letzten Ausdruck die Projektion des Drehmoments auf  $A$ .

Also haben wir insgesamt

$$\frac{d}{dt} (I_A \dot{\varphi}) = \bar{e}_A \cdot \bar{M} . \quad (3.10)$$

Wir erinnern uns nun, dass für Massenpunkte (wir unterdrücken den Index  $a$ )

$$\bar{L} = m \bar{r} \times \bar{v} \quad \text{und demnach} \quad \bar{e}_A \cdot \bar{L} = m \bar{e}_A \cdot [(\bar{r}_{\parallel} + \bar{r}_{\perp}) \times \bar{v}] . \quad (3.11)$$

Der achsenparallele Anteil  $\bar{r}_{\parallel}$  des Vektors  $\bar{r}$  kann fortgelassen werden, da  $\bar{r}_{\parallel} \times \bar{v}$  orthogonal zu  $\bar{e}_A$  ist. Außerdem sind  $\bar{r}_{\perp}$  und  $\bar{v}$  orthogonal. Wie man aus dem Bild leicht sieht, ist ihre Lage so, dass  $\bar{r}_{\perp} \times \bar{v}$  in Richtung von  $\bar{e}_A$  zeigt. Da  $v = r_{\perp} \dot{\varphi}$  gilt, folgt  $\bar{r}_{\perp} \times \bar{v} = r_{\perp}^2 \dot{\varphi} \bar{e}_A$ . Man erhält damit

$$\bar{e}_A \cdot \bar{L} = m r_{\perp}^2 \dot{\varphi} . \quad (3.12)$$

Nach Summation über die Massenpunkte bzw. kleinen Volumenelemente ergibt sich

$$\bar{e}_A \cdot \bar{L} = I_A \dot{\varphi} . \quad (3.13)$$

Gleichung (3.10) besagt also nichts anderes als

$$\bar{e}_A \cdot \dot{\bar{L}} = \bar{e}_A \cdot \dot{\bar{M}} , \quad (3.14)$$

was gerade der Projektion der bekannten Beziehung  $\dot{\bar{L}} = \dot{\bar{M}}$  auf die feste Achse entspricht. Wichtig ist, dass wir im Gegensatz zur Behandlung nach Newton, nichts über die im Körper und durch die Achse übertragenen Kräfte wissen müssen.

$I_A$  ist besonders einfach zu berechnen, falls schon das Trägheitsmoment  $I_S$  bezüglich der zu  $A$  parallelen **Schwerpunktsachse**  $S$  (Achse durch den Schwerpunkt) bekannt ist. Die geometrische Situation ist in Abb. 7 dargestellt. Es gilt

$$I_A = \sum_a m_a \cdot r_{a,\perp}^2 = \sum_a m_a (\bar{R}_{\perp} + \bar{r}'_{a,\perp})^2 . \quad (3.15)$$

Die Summer der Mischterme im letzten Quadrat gibt Null,<sup>5</sup> so dass man

$$I_A = \sum_a m_a \left( \bar{R}_{\perp}^2 + \bar{r}'_{a,\perp}{}^2 \right) \quad \text{bzw.} \quad I_A = M \bar{R}_{\perp}^2 + I_S \quad (3.16)$$

findet. Hier ist  $M$  die Gesamtmasse und die letzte Aussage ist der **Satz von Steiner**.

---

<sup>5</sup> Die Lage des Schwerpunkts in der transversalen Ebene ergibt sich einerseits per Definition als  $\sum_a m_a \bar{r}'_{a,\perp} / M$ , andererseits liegt er aus Sicht der Achse  $S$  bei Null, weil dies ja gerade die Schwerpunktsachse ist.

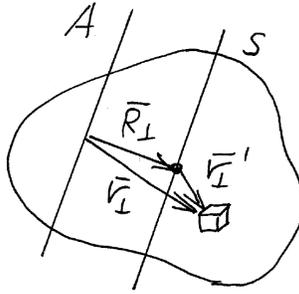


Abbildung 7: Schwerpunktsachse  $S$  parallel zur festen Rotationsachse  $A$ .

### 3.2 Trägheitstensor

Wir erinnern zunächst an das, was schon im letzten Semester zur kinetischen Energie des rotierenden starren Körpers gesagt worden ist.<sup>6</sup> Allerdings lassen wir jetzt auch noch eine Schwerpunktschwindigkeit  $\bar{v}$  zu:

$$T = \sum_a \frac{m_a}{2} \bar{v}_a^2 = \sum_a \frac{m_a}{2} (\bar{v} + \bar{\omega} \times \bar{r}_a)^2 = \sum_a \frac{m_a}{2} [\bar{v}^2 + 2\bar{v} \cdot (\bar{\omega} \times \bar{r}_a) + (\bar{\omega} \times \bar{r}_a)^2] . \quad (3.17)$$

Hierbei entspricht  $\bar{\omega}$  einer (im Prinzip zeitabhängigen) Drehachse durch den Schwerpunkt und  $\bar{r}_a$  ist der Vektor vom Schwerpunkt zum Element  $a$  des Körpers, vgl. Abb. 8.

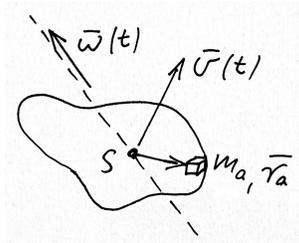


Abbildung 8: Unregelmäßiger Körper mit Schwerpunktschwindigkeit  $\bar{v}(t)$ , der zusätzlich mit Winkelgeschwindigkeit  $|\bar{\omega}|$  um eine Schwerpunktsachse der Richtung  $\bar{\omega}/|\bar{\omega}|$  rotiert.

Der Term

$$\sum_a m_a 2\bar{v} \cdot (\bar{\omega} \times \bar{r}_a) \quad \text{verschwindet, weil} \quad \sum_a m_a \bar{r}_a = 0 \quad (3.18)$$

gilt. Es folgt

$$T = \frac{M}{2} \bar{v}^2 + \sum_a \frac{m_a}{2} (\bar{\omega} \times \bar{r}_a)^2 = \frac{1}{2} M \bar{v}^2 + \frac{1}{2} I^{ij} \omega^i \omega^j , \quad (3.19)$$

mit

$$I^{ij} \equiv \sum_a m_a \left( \delta^{ij} \bar{r}_a^2 - (r_a)^i (r_a)^j \right) . \quad (3.20)$$

<sup>6</sup>Vgl. Theoretische Physik I, Kapitel 6, speziell 6.6.

Die Herleitung, die nur das Umformen eines Ausdrucks mit zwei  $\varepsilon$ -Tensoren erfordert, hatten wir schon gegeben. Die entsprechende Kontinuumsformel für den **Trägheitstensor** lautet

$$I^{ij} = \int d^3\bar{r} \rho(\bar{r}) (\delta^{ij}\bar{r}^2 - r^i r^j) . \quad (3.21)$$

Der Ursprung des für die Definition des Trägheitstensors benutzten Koordinatensystems liegt (vgl. unsere Annahme weiter oben) im Schwerpunkt. Eine solche Wahl ist allgemein üblich. Der Vollständigkeit halber sei aber erwähnt, dass man  $I^{ij}$  im Prinzip auch bezüglich eines anderen, fest gewählten Punktes des Körpers definieren könnte. Falls dieser Punkt ruht, gilt die obige Formel für  $T$  (mit  $\bar{v} = 0$ ) immer noch.

Speziell mit  $\bar{r} = (x, y, z)$  erhält man

$$I = \int dx dy dz \rho(\bar{r}) \begin{pmatrix} y^2 + z^2 & -xy & -xz \\ -xy & x^2 + z^2 & -yz \\ -xz & -yz & x^2 + y^2 \end{pmatrix} . \quad (3.22)$$

Diese Form ist bei der expliziten Berechnungen manchmal nützlich.

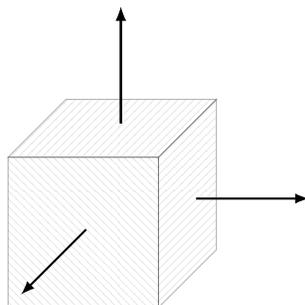


Abbildung 9: Homogener Würfel mit Kantenlänge  $a$ , Zentrum des Würfels im Koordinatenursprung.

In dem Beispiel aus Abbildung 9 hat man

$$\int dx \rightarrow \int_{-a/2}^{a/2} dx \quad \text{und z.B.} \quad \int_{-a/2}^{a/2} dx \int_{-a/2}^{a/2} dy y^2 \int_{-a/2}^{a/2} dz = a \cdot \frac{a^3}{12} \cdot a . \quad (3.23)$$

Insgesamt ergibt sich der Trägheitstensor

$$I = a^5 \cdot \rho \cdot \begin{pmatrix} 1/6 & 0 & 0 \\ 0 & 1/6 & 0 \\ 0 & 0 & 1/6 \end{pmatrix} = \frac{1}{6} M \cdot a^2 \cdot \mathbb{1} . \quad (3.24)$$

### 3.3 Eigenwerte, Eigenvektoren, Diagonalisierbarkeit (M)

Dieser Abschnitt sollte eigentlich Teil der grundlegenden Mathematik-Ausbildung des Physikers sein, wird aber hier eingeschoben, da es gelegentlich vorkommt, dass erst in LA II

und damit für uns zu spät gelehrt wird. Die folgende Darstellung ist sehr knapp und ohne Beispiele. Sie wird daher nicht geprüft werden. Das Ergebnis (die Diagonalisierbarkeit) muss aber wenigstens als Fakt verstanden sein.

Sei  $\mathbb{V} = \mathbb{C}^n$  ein Vektorraum über  $\mathbb{C}$ . Definiere das Skalarprodukt ( $\forall x, y \in \mathbb{V}$ )

$$x, y \mapsto \langle x, y \rangle \equiv x^\dagger y \in \mathbb{C}. \quad (3.25)$$

Hier benutzen wir die Notation  $M^\dagger \equiv \overline{M}^T$  für alle komplexen Matrizen, insbesondere auch für Spalten-Vektoren.

Sei  $H$  eine hermitesche ( $n \times n$ )–Matrix, also  $H^\dagger = H$ . Um  $H$  zu diagonalisieren, lösen wir zunächst (was per Fundamentalsatz der Algebra stets möglich ist) die Gleichung

$$\det(H - \lambda \mathbb{1}) = 0 \quad (3.26)$$

und nennen eine der Lösungen  $\lambda_1$ . Da nun  $\det(H - \lambda_1 \mathbb{1}) = 0$ , hat die Gleichung

$$(H - \lambda_1 \mathbb{1})x = 0 \quad (3.27)$$

stets<sup>7</sup> eine nichttriviale Lösung  $x_1 \in \mathbb{V}$ . In der oben beschriebenen Situation nennt man  $x_1$  einen Eigenvektor von  $H$  zum Eigenwert  $\lambda_1$  und schreibt

$$Hx_1 = \lambda_1 x_1. \quad (3.28)$$

Eine wichtige Behauptung ist nun:  $H$  bildet  $\{x_1\}_\perp$  (das orthogonale Komplement zu  $x_1$ ) auf  $\{x_1\}_\perp$  ab. Zur Begründung betrachten wir ein  $y \in \mathbb{V}$  mit  $\langle y, x_1 \rangle = 0$  und berechnen

$$\langle Hy, x_1 \rangle = (Hy)^\dagger x_1 = y^\dagger Hx_1 = \langle y, Hx_1 \rangle = \lambda_1 \langle y, x_1 \rangle = 0, \quad (3.29)$$

was die Behauptung bestätigt. Jetzt können wir nach entsprechendem Basiswechsel die  $(n - 1) \times (n - 1)$ –Matrix  $H_1$  betrachten, welche die Wirkung von  $H$  auf dem Unterraum  $\{x_1\}_\perp$  beschreibt. Diese ist wieder hermitesch und wir wiederholen unser obiges Argument, finden einen Eigenwert  $\lambda_2$  und Eigenvektor  $x_2$ , usw. usf.

Wenn der Prozess endet, haben wir  $n$  Eigenvektoren  $x_i$  und wählen eine normierte Basis

$$e_1, \dots, e_n \sim x_1, \dots, x_n. \quad (3.30)$$

Diese ist nach obiger Konstruktion auch orthogonal. Man bezeichnet nun Matrizen  $U$ , welche eine Orthonormalbasis in eine Orthonormalbasis überführen als unitär. Dies ist äquivalent zur Definition durch die Bedingung  $U^\dagger = U^{-1}$  (das ist leicht zu zeigen, aber wir beweisen es hier nicht).

Da unsere ursprüngliche, aus der Definition  $\mathbb{V} = \mathbb{C}^n$  folgende Basis eine Orthonormalbasis war, und da  $H$  in der neuen Basis offensichtlich diagonal ist, haben wir gezeigt: Hermitesche Matrizen sind durch unitäre Transformationen diagonalisierbar.

---

<sup>7</sup> In der Tat, falls die einzige Lösung Null wäre, könnte man sich leicht überlegen, dass die Matrix invertierbar sein müsste, im Widerspruch zur verschwindenden Determinante.

Wir behaupten nun zusätzlich: Die  $\lambda_i$  sind reell. Zur Begründung rechnen wir z.B. einerseits

$$\langle Hx_1, x_1 \rangle = \langle \lambda_1 x_1, x_1 \rangle = \bar{\lambda}_1 \langle x_1, x_1 \rangle \quad (3.31)$$

und andererseits

$$\langle Hx_1, x_1 \rangle = \langle x_1, Hx_1 \rangle = \lambda_1 \langle x_1, x_1 \rangle. \quad (3.32)$$

Demnach gilt  $\bar{\lambda}_1 = \lambda_1$ , wie behauptet.

Als Korollar folgt aus der obigen Diskussion, dass reelle symmetrische Matrizen ( $H = H^\dagger$  mit  $H_{ij} \in \mathbb{R}$ ) durch orthogonale Transformationen diagonalisiert werden können. Dazu finden wir zunächst wie oben  $\lambda_1 \in \mathbb{C}$ , sehen dann aber sofort dass, wie eben erklärt, darüberhinaus  $\lambda_1 \in \mathbb{R}$  gelten muss. Da  $H$  reell ist, muss es zu der Gleichung

$$(H - \lambda_1 \mathbb{1})x = 0 \quad (3.33)$$

in diesem Fall auch eine reelle Lösung  $x = x_1$  geben. Dies setzen wir, wie oben im komplexen Fall durchgeführt, mit der Suche nach dem zweiten Eigenwert und Eigenvektor fort, bis die Matrix komplett diagonalisiert ist. Die benutzten Transformationen, die eine reelle Orthonormalbasis auf eine andere reelle Orthonormalbasis abbilden heißen, wie wir schon wissen, orthogonal und werden durch orthogonale Matrizen vermittelt.

### 3.4 Hauptträgheitsachsen

Erinnerung: Ein Tensor ist (analog zum Vektor) ein geometrisches Objekt, welches unabhängig von der Komponentenform Realität besitzt. Speziell der Trägheitstensor beschreibt die Massenverteilung und damit indirekt die Geometrie eines Körpers. Analog zum Vektor transformiert sich der Tensor in bestimmter Weise bei Drehungen (Abb. 10):

$$I'^{ij} = R^{ik} R^{jl} I^{kl} \quad \text{bzw. in Matrixschreibweise} \quad I' = R \cdot I \cdot R^T = R \cdot I \cdot R^{-1}. \quad (3.34)$$

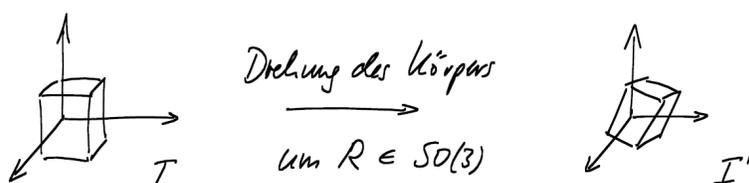


Abbildung 10: Drehung eines Körpers.

Dies ist die aktive Sicht von Symmetrietransformation. Äquivalent dazu ist die passive Sicht, bei der das Koordinatensystem um  $R^{-1}$  gedreht wird (Abb. 11). Wieder gilt:

$$I'^{ij} = R^{ik} R^{jl} I^{kl}. \quad (3.35)$$

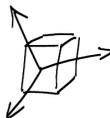


Abbildung 11: Drehung es Koordinatensystems in Analogie zu Abb. 10.

Ein zentraler Satz aus der linearen Algebra (siehe letztes Kapitel) besagt: **Jede symmetrische, reelle Matrix kann durch eine orthogonale Transformation auf Diagonalform gebracht werden.** Wir können demnach stets

$$I = \begin{pmatrix} I_1 & 0 & 0 \\ 0 & I_2 & 0 \\ 0 & 0 & I_3 \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

erreichen, indem wir entweder den Körper entsprechend drehen oder das Koordinatensystem passend wählen. Die Elemente  $I_1, I_2, I_3$  heißen **Hauptträgheitsmomente** des Körpers. Die Koordinatenachsen  $\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3$  des Systems, in dem  $I$  diagonal ist, heißen **Hauptträgheitsachsen**. Im Allgemeinen entsprechen diese den Symmetrieachsen des Körpers, sofern es welche gibt.

Sei  $\bar{v} = 0$  und  $\bar{\omega} = \omega \cdot \hat{e}$ , wobei  $\hat{e}$  ein beliebiger Einheitsvektor ist. Dann gilt

$$T = \frac{1}{2} I^{ij} \omega^i \omega^j = \frac{1}{2} I^{ij} \hat{e}^i \hat{e}^j \omega^2 \equiv \frac{1}{2} I_e \omega^2. \quad (3.37)$$

Daher ist  $(I^{ij} \hat{e}^i \hat{e}^j)$  das Trägheitsmoment bezüglich der Achse  $\hat{e}$ .

Sei nun speziell  $I$  diagonal und  $\hat{e} = \hat{e}_1 = (1, 0, 0)^T$ . Dann folgt

$$I_e = I^{11} = I_1. \quad (3.38)$$

Die Hauptträgheitsmomente sind demnach gerade die Trägheitsmomente bezüglich der Hauptträgheitsachsen.

Es gilt außerdem (immer noch im oben definierten **Hauptachsensystem** oder **Hauptträgheitssystem**):

$$I^{ij} (\hat{e}_1)^j = I^{ij} \delta^{j1} = I^{i1} = I_1 \delta^{i1} = I_1 (\hat{e}_1)^i. \quad (3.39)$$

In Matrixschreibweise lautet diese Aussage

$$I \cdot \bar{e}_1 = I_1 \bar{e}_1. \quad (3.40)$$

Demnach ist  $\hat{e}_1$  ein **Eigenvektor** von  $I$  mit **Eigenwert**  $I_1$ . Dies ist aber eine koordinatenunabhängige Aussage. Einmal gezeigt, gilt sie in allen Systemen. In der Tat, durch Multiplikation mit  $R$  von links findet man

$$R \cdot I \cdot \hat{e}_1 = I_1 R \cdot \hat{e}_1$$

$$(R \cdot I \cdot R^{-1}) \cdot R \cdot \hat{e}_1 = I_1 R \cdot \hat{e}_1 \quad (3.41)$$

$$I' \cdot \hat{e}'_1 = I_1 \hat{e}'_1. \quad (3.42)$$

Zusammenfassend haben wir also gefunden: Die Matrix  $I$  hat 3 Eigenvektoren  $\hat{e}_{(a)}$ . Diese Eigenvektoren definieren die Hauptträgheitsachsen und  $I_a$  sind die zugehörigen Hauptträgheitsmomente.

### 3.5 Das Trägheitsellipsoid

Das einzige uns bisher bekannte Beispiel für einen Trägheitstensor ist das des **Würfels**, wobei wir durch explizite Rechnung  $I \sim \mathbb{1}$  gefunden haben.

Im Fall einer **Kugel** kommen wir, zumindest auf qualitativem Niveau, sogar ganz ohne Rechnung aus: Eine Kugel wird nämlich durch jede Drehung (um ihren Mittelpunkt) in sich selbst überführt. Es muss also

$$I = R \cdot I \cdot R^{-1} \quad , \quad \text{für alle } R \in SO(3) \quad , \quad (3.43)$$

gelten. Demnach ist  $I$  ein invarianter Tensor vom Rang 2. Wir berufen uns nun auf einen wichtigen **Fakt** aus der linearen Algebra:

In  $d \geq 3$  Dimensionen ist  $\delta_{ij}$  (bis auf Normierung) **der einzige** unter Drehungen invariante Tensor vom Rang 2.

Damit haben wir gezeigt, dass für eine Kugel  $I \sim \mathbb{1}$ , beziehungsweise  $I^{ij} = \# \cdot m \cdot R^2 \cdot \delta^{ij}$ . Der numerische Vorfaktor  $\#$  muss natürlich berechnet werden.

Betrachten wir nun ein etwas weniger symmetrisches Beispiel: eine **Hantel** mit Masse  $2m$  und masseloser Verbindungsstange, vgl. Abb. 12. Als Positionen der (als punktförmig genäherten) ‘‘Hantelscheiben’’ mit Massen  $m_1 = m_2 = m$  wählen wir  $\bar{r}_1 = (0, 0, a)^T$  und  $\bar{r}_2 = (0, 0, -a)^T$  und finden:

$$\begin{aligned} I^{ij} &= \sum_{\alpha} m_{\alpha} (\delta^{ij} \bar{r}_{\alpha}^2 - (r_{\alpha})^i (r_{\alpha})^j) = 2m (\delta^{ij} \bar{r}^2 - r^i r^j)_{\bar{r}=(0,0,a)} \\ &= 2m \cdot a^2 \left( \mathbb{1} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right)^{ij} = 2m \cdot a^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^{ij} . \end{aligned} \quad (3.44)$$

Wir können nun leicht raten, dass der Trägheitstensor einer realistischen Hantel die Form

$$I = 2m \cdot a^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon \end{pmatrix} \quad (3.45)$$

mit  $\epsilon \ll 1$  haben wird. Wir sehen hier die Äquivalenz von  $x^1$  und  $x^2$ -Achse und Sonderrolle der  $x^3$ -Achse.

Es liegt nahe zu vermuten, dass es eine allgemeine Beziehung zwischen Form des Körpers und Form von  $I$  gibt. Um dies klarer zu formulieren, machen wir zunächst folgende einfache Beobachtung:

So wie Vektor einem Pfeil im  $\mathbb{R}^3$  entspricht, **so entspricht ein symmetrischer Tensor vom Rang 2 einer ‘Fläche 2. Grades’**. Letztere wird durch die Gleichung

$$t^{ij} x^i x^j = 1 \quad (3.46)$$

definiert, wobei  $t$  der relevante Tensor ist und der Grad der Gleichung den Namen erklärt.

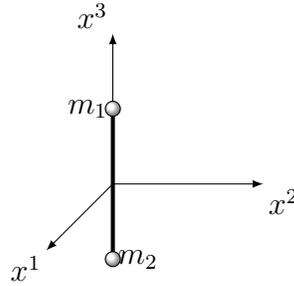


Abbildung 12: Hantel mit Masse  $2m$  und masseloser Verbindungsstange.

Wir setzen nun  $t \equiv I$  und gehen ins Hauptachsensystem:

$$I^{ij}x^i x^j = 1 \quad \Rightarrow \quad I_1(x^1)^2 + I_2(x^2)^2 + I_3(x^3)^2 = 1. \quad (3.47)$$

Die oben auftretenden Eigenwerte sind bei uns stets positiv, so dass wir ein **Ellipsoid** finden, vgl. Abb. 13. In anderen Koordinatensystemen ist das Ellipsoid entsprechend gedreht.

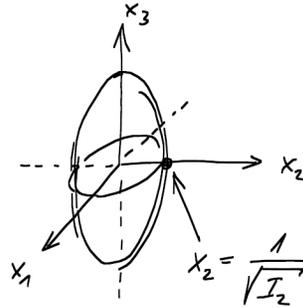


Abbildung 13: Trägheitsellipsoid.

Eine beliebige durch  $\hat{e}$  (mit  $\hat{e}^2 = 1$ ) definierte Achse schneide das Ellipsoid bei  $\bar{x}_e$ . Offensichtlich gilt dann

$$\bar{x}_e = \hat{e} \cdot |\bar{x}_e| \quad (\bar{x}_e \text{ liegt auf Achse}) \quad (3.48)$$

$$1 = I^{ij}(x_e)^i (x_e)^j \quad (\bar{x}_e \text{ liegt auf Ellipsoid}). \quad (3.49)$$

Daraus folgt

$$1 = I^{ij}(x_e)^i (x_e)^j = I^{ij} \hat{e}^i \hat{e}^j \cdot |\bar{x}_e|^2 = I_e |\bar{x}_e|^2 \quad \text{und somit} \quad |\bar{x}_e| = \frac{1}{\sqrt{I_e}}. \quad (3.50)$$

Die Länge des positiven, im Ellipsoid liegenden Teils einer gewissen Achse ist als **das Inverse der Wurzel des Trägheitsmoment bzgl. dieser Achse**. Wenn dieser Achsenteil groß ist, ist das Trägheitsmoment klein. Das Trägheitsmoment ist aber genau dann klein, wenn der Körper in den **anderen** Richtungen (orthogonal zur Achse) eine kleine Ausdehnung hat. Also gilt:

**Das Trägheitsellipsoid folgt (ungefähr) der Form des Körpers** (Abb. 14).

Körper			
Ellipsoid	 (Kugel)	 (stehendes Ellipsoid)	 (abgeflachte Kugel)

Abbildung 14: Trägheitsellipsoid folgt der Form des Körpers.

### 3.6 Trägheitstensor und Drehimpuls - mehr zur Geometrie

Wir erinnern uns, dass ein Tensor  $t$  vom Rang 2 durch eine bilineare Abbildung

$$t : \mathbb{V} \times \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad (x, y) \mapsto t^{ij} x^i y^j \quad (3.51)$$

definiert ist. In unserem Fall ist diese Abbildung durch

$$I : (\bar{\omega}, \bar{\omega}) \mapsto I^{ij} \omega^i \omega^j = 2T \quad (3.52)$$

gegeben und hat demnach ganz unmittelbar physikalische Bedeutung: Sie stellt die Verbindung zwischen Winkelgeschwindigkeit  $\bar{\omega}$  und kinetischer Energie  $T$  her.

Im euklidischen Raum<sup>8</sup> definiert ein Tensor analog eine Abbildung

$$t : \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{V} \quad , \quad \{x^i\} \mapsto \{t^{ij} x^j\} \quad \text{bzw. (in Matrixnotation)} \quad x \rightarrow tx, \quad (3.53)$$

wobei wir mit  $\{x^i\}$  die Menge aller Komponenten von  $\bar{x}$  bezeichnen. Auch dies lässt in unserem Fall eine einfache physikalische Interpretation zu

$$I : \{\omega^i\} \mapsto \{I^{ij} \omega^j\} = \{L^i\} \quad \text{also} \quad \bar{\omega} \mapsto \bar{L}. \quad (3.54)$$

Hier haben wir *behauptet*, dass  $L^i = I^{ij} \omega^j$  gilt. Das ist in der Tat leicht nachzurechnen: Zunächst haben wir für einen Massenpunkt mit Abstand  $\bar{r}$  von einem festen Ursprung

$$\bar{L} = \bar{r} \times \bar{p} = m \bar{r} \times \dot{\bar{r}} = m \bar{r} \times (\bar{\omega} \times \bar{r}). \quad (3.55)$$

Hierbei haben wir im letzten Schritt  $\dot{\bar{r}}$  als Folge einer Drehung von  $\bar{r}$  um den Ursprung interpretiert. Weiterhin gilt

$$L^i = m \varepsilon^{ijk} r^j (\varepsilon^{klm} \omega^l r^m) = \dots = m (\delta^{ij} \bar{r}^2 - r^i r^j) \omega^j, \quad (3.56)$$

wobei die detaillierte Berechnung analog zu der von  $T$  mithilfe der bekannten Formel “ $\varepsilon \varepsilon = \delta \delta - \delta \delta$ ” geschieht. Nach Summation über viele Punkte folgt

$$L^i = \sum_a m_a (\delta^{ij} \bar{r}_a^2 - (r_a)^i (r_a)^j) \omega^j = I^{ij} \omega^j \quad (3.57)$$

oder, in Matrixschreibweise,

$$L = I \cdot \omega. \quad (3.58)$$

Dies ist ein wichtiges Resultat.

<sup>8</sup> Eigentlich definiert ein Tensor nur eine Abbildung  $\mathbb{V} \rightarrow \mathbb{V}^*$ , aber im euklidischen Raum (oder jedem anderen Raum mit Metrik) können wir  $\mathbb{V}^*$  auf eine kanonische Art mit  $\mathbb{V}$  identifizieren.

# 4 Kreisel

## 4.1 Eulergleichungen

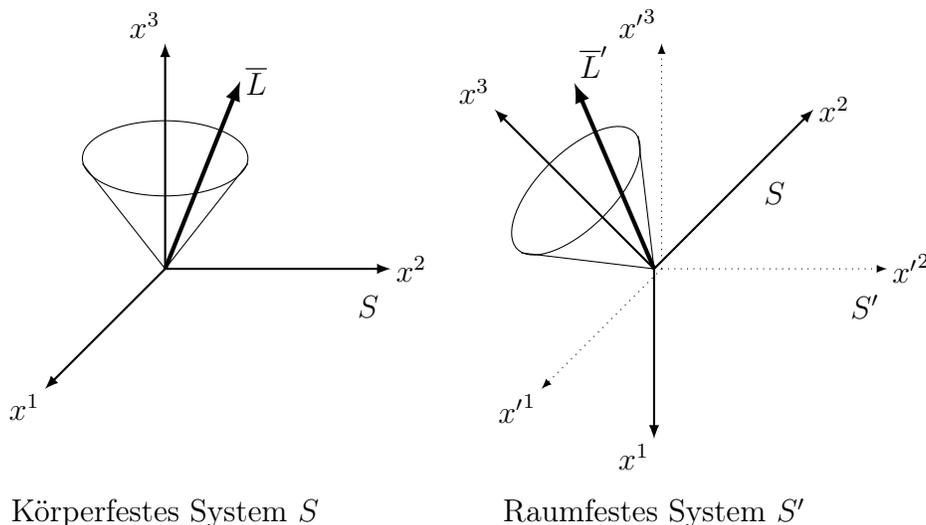


Abbildung 15: Kreisel aus Sicht eines körperfesten und raumfesten Systems

Wir können einen Kreisel im körperfesten Systems  $S$  oder im raumfesten System  $S'$  betrachten, vgl. Abb. 15. Der Übergang kann durch eine zeitabhängige Drehmatrix  $R(t) \in SO(3)$  beschrieben werden, so dass z.B.

$$L' = RL \quad , \quad v' = Rv \quad \text{etc.} \quad (4.1)$$

gilt. Die Bewegungsgleichungen lauten

$$\dot{L}' = M' \quad \text{oder} \quad \frac{d}{dt}(RL) = RM \quad \text{oder} \quad \dot{R}L + R\dot{L} = RM. \quad (4.2)$$

Aus unserer Diskussion der rotierenden Systeme in der Theoretischen Physik I, Kapitel 6.5, wissen wir noch:

$$\dot{R}r = R(\omega \times r). \quad (4.3)$$

Hier ist  $\omega$  die Winkelgeschwindigkeit des rotierenden Systems aus Sicht des rotierenden Systems. Diese Formel gilt nicht nur für  $r$  sondern für jeden Vektor, insbesondere auch für  $L$ . Damit folgt

$$R(\omega \times L) + R\dot{L} = RM \quad \text{bzw.} \quad \dot{L} = M + (L \times \omega). \quad (4.4)$$

Im körperfesten System ist  $I$  eine konstante Matrix und es gilt  $L = I\omega$ . Wir erhalten also

$$I\dot{\omega} = M + (I\omega) \times \omega. \quad (4.5)$$

Jetzt wählen wir als körperfestes System noch speziell das Hauptachsensystem, sodass  $I = \text{diag}(I_1, I_2, I_3)$ . Damit erhalten wir als eine besonders nützliche Form der Bewegungsgleichungen des Kreisels die sogenannten **Euler-Gleichungen**:

$$\begin{aligned} I_1 \dot{\omega}^1 &= M^1 + \omega^2 \omega^3 (I_2 - I_3) \\ I_2 \dot{\omega}^2 &= M^2 + \omega^3 \omega^1 (I_3 - I_1) \\ I_3 \dot{\omega}^3 &= M^3 + \omega^1 \omega^2 (I_1 - I_2). \end{aligned} \quad (4.6)$$

## 4.2 Freier Kiesel - qualitativ

Wir starten mit der Energieerhaltung, und zwar im Hauptachsensystem:

$$E = T = \frac{1}{2} \omega^T \cdot I \cdot \omega = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 I_i (\omega^i)^2. \quad (4.7)$$

Mit  $L^i = I_i \omega^i$  (ohne Summation) folgt weiter

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \frac{(L^i)^2}{I_i} \quad (4.8)$$

oder

$$\frac{(L^1)^2}{2E I_1} + \frac{(L^2)^2}{2E I_2} + \frac{(L^3)^2}{2E I_3} = 1. \quad (4.9)$$

Wenn wir uns an die allgemeine Formel für ein Ellipsoid erinnern,

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1, \quad (4.10)$$

dann sehen wir, dass die obige Gleichung im ‘‘L-Raum’’ ein Ellipsoid mit Halbachsen  $\sqrt{2E I_i}$  beschreibt. Dieses heißt **Binet-Ellipsoid**.

Weiterhin nutzen wir die Drehimpulserhaltung,  $L' = \text{const.}$  Mit  $L' = RL$  bzw.  $L = R^{-1}L'$  sehen wir natürlich, dass  $L$  (die drei Körpersystem-Komponenten des abstrakten Vektors) **nicht** konstant ist. Allerdings ist sein Betrag konstant, da  $R$  eine Drehmatrix ist:

$$|\bar{L}| = \text{const.} \quad (4.11)$$

**Also bewegt sich  $L$  im körperfesten System auf Schnittkurven von Binet-Ellipsoid und einer Kugel mit Radius  $|\bar{L}| = |\bar{L}'|$ .**

Wir legen nun o.B.d.A. fest, dass  $I_1 > I_2 > I_3$  und betrachten die verschiedenen mathematisch denkbaren Fälle:

(1): Der Fall  $|\bar{L}| < \sqrt{2E I_3}$  ist unmöglich, da Kugel und Ellipsoid keine gemeinsamen Punkte haben, vgl. Abb. 16.

(2) Der Fall  $|\bar{L}| = \sqrt{2E I_3}$  charakterisiert eine ‘‘einbeschriebene Kugel’’, welche die beiden Berührungspunkte  $L = \pm (0, 0, \sqrt{2E I_3})^T$  mit dem Ellipsoid teilt. Physikalisch haben wir es demnach mit einer Rotation des Körpers um die feste Achse  $\bar{\omega} \parallel \bar{e}_3$  zu tun.

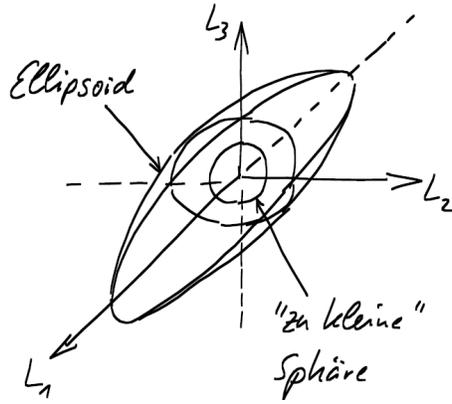


Abbildung 16: Binet-Ellipsoid mit zu kleiner und einbeschriebener Kugel (Fälle (1) und (2)).

(3) Der Fall  $\sqrt{2EI_3} < |\bar{L}| < \sqrt{2EI_2}$  gibt zwei geschlossene Schnittkurven, vgl. Abb. 17.  $L$  bewegt sich im körperfesten System entlang einer dieser Kurven. Im raumfesten System entspricht dies einer kräftefreien Präzession des Kreisels. Im Grenzübergang zu Fall (2) bewegt sich  $L$  auf einer kleinen, geschlossenen Kurve um einen der isolierten Punkte aus Fall (2) zeigen. Dies zeigt, dass die Bewegung von (2) stabil ist.

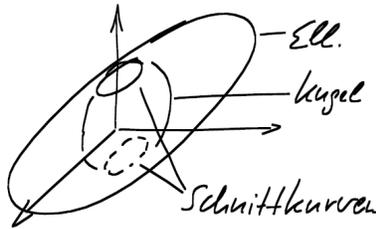


Abbildung 17: Binet-Ellipsoid mit Kugel im Fall (3).

(4) Im Fall  $|\bar{L}| = \sqrt{2EI_2}$  ergeben sich zwei kreuzende Kurven.  $L$  sitzt entweder an einem Kreuzungspunkt (was aber instabil ist) oder es bewegt sich entlang einer der Kurven, vgl. Abb. 18.

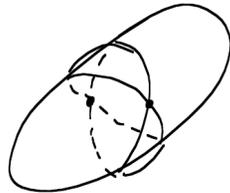


Abbildung 18: Binet-Ellipsoid mit Kugel im Fall (4).

(5) Im Fall  $\sqrt{2EI_2} < |\bar{L}| < \sqrt{2EI_1}$  hat man es, ähnlich zu Fall (3), mit zwei geschlossenen Kurven zu tun.

(6) Im Fall  $|\bar{L}| = \sqrt{2EI_1}$  ergeben sich zwei Berührungspunkte. Dies ist der stabile Grenzfall zu Fall (5), analog zu (2) als stabilem Grenzfall zu Fall (3).

(7) Der Fall  $|\bar{L}| > \sqrt{2EI_1}$  ist, analog zu Fall (1), physikalisch nicht realisierbar.

Man kann schliesslich noch versuchen, sich die Fälle (2) bis (6) gemeinsam zu veranschaulichen, indem man das Binet-Ellipsoid mit allen Schnittkurven von  $y = \infty$  aus betrachtet. Dies ist in Abb. 19 dargestellt.

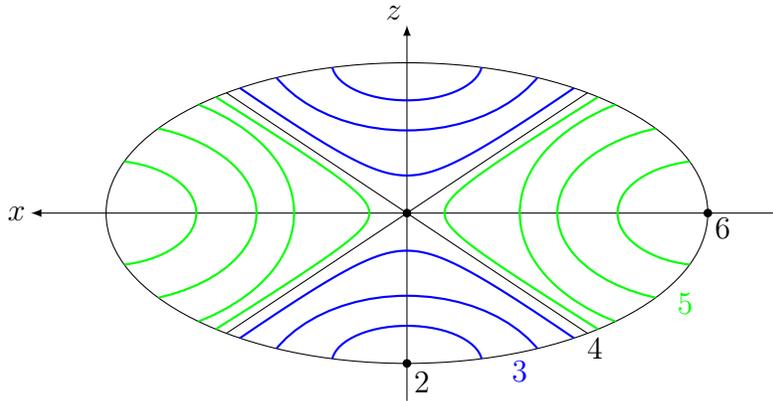


Abbildung 19: Binet-Ellipsoid aus Sicht von  $y = \infty$ .

Man kann alternativ auch eine geometrische Analyse im raumfesten System durchführen. Dies führt zu einem sehr schönen Ergebnis, das als **Poinsot-Konstruktion** bekannt ist. Wir betrachten dazu das durch

$$E = \frac{1}{2} I'^{ij} \omega'^i \omega'^j \quad (4.12)$$

definierte Ellipsoid im  $\omega'$ -Raum. Das Zentrum des Ellipsoids ist fix, aber es dreht sich mit der Bewegung des Kreisels, weil sich  $I'$  mit dem Kiesel bewegt. Man kann sich überlegen, dass diese Bewegung als ein Rollen auf einer festen, durch  $L'$  definierten Ebene beschrieben werden kann, vgl. Abb. 20. Details finden sich z.B. in den handschriftlichen Notizen zu meinem Mechanik-Kurs von 2006. Eine sehr schönes Video dazu findet sich unter <https://www.youtube.com/watch?v=BwYFT3T5uIw>

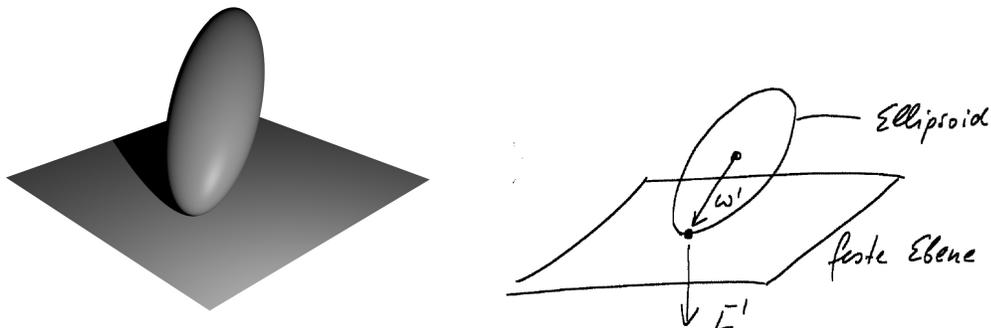


Abbildung 20: Poinsot-Konstruktion für den freien Kiesel.

### 4.3 Freier Kreisel - analytisch

Die drei Euler-Gleichungen sind

$$I_1 \dot{\omega}^1 = \omega^2 \omega^3 (I_2 - I_3) \quad \text{und zyklische Permutationen davon.} \quad (4.13)$$

Falls zwei der drei Komponenten von  $\bar{\omega}$  verschwinden, folgt offenbar  $\bar{\omega} = \text{const.}$  Dies entspricht den in 4.2 besprochenen stationären Lösungen (Rotation um eine der Hauptachsen), von denen eine instabil ist.

Für den Rest des Abschnitts betrachten wir zur Vereinfachung den Fall  $I_1 = I_2 < I_3$  und definieren  $I_0 \equiv I_{1,2}$ . Dies trifft z.B. auf eine leicht abgeplattete Kugel wie die Erde zu. Man hat dann

$$\begin{aligned} I_0 \dot{\omega}^1 &= (I_0 - I_3) \omega^2 \omega^3 \\ I_0 \dot{\omega}^2 &= -(I_0 - I_3) \omega^3 \omega^1 \\ I_3 \dot{\omega}^3 &= 0 \end{aligned} \quad (4.14)$$

und demnach  $\omega^3 = \text{const.}$  Wir parametrisieren diese Konstante durch

$$\alpha \equiv \omega^3 \left( \frac{I_3}{I_0} - 1 \right) \quad (4.15)$$

und finden somit

$$\begin{aligned} \dot{\omega}^1 &= -\alpha \omega^2 \\ \dot{\omega}^2 &= \alpha \omega^1. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Eliminieren von  $\omega^2$  liefert  $\ddot{\omega}^1 = -\alpha^2 \omega^1$ , was die allgemeine Lösung  $\omega^1 = A \cos(\alpha t + \varphi)$  hat. Nachdem wir o.B.d.A.:  $\varphi = 0$  gesetzt haben ergibt sich die als **freie Präzession** (mit Präzessionsfrequenz  $\alpha$ ) bekannte allgemeine Lösung

$$\begin{aligned} \omega^1 &= A \cos(\alpha \cdot t) \\ \omega^2 &= A \sin(\alpha \cdot t) \\ \omega^3 &= \text{const.} \end{aligned} \quad (4.17)$$

Dabei bewegt sich die Spitze von  $\bar{\omega}$  auf einem Kreis in der Ebene  $\omega^3 = \text{const.}$  Dies entspricht der in 4.2 gefundenen Bewegung von  $\bar{L}$  auf einer Schnittkurve von Ellipsoid und Kugel.

Im konkreten Fall der Erde hat man

$$\left( \frac{I_3}{I_0} - 1 \right) \sim 0.003 = \varepsilon \quad , \quad \alpha = \omega_{\text{Erde}} \varepsilon \quad (4.18)$$

und somit

$$T_{\text{Präz.}} = \frac{T_{\text{Erde}}}{\varepsilon} \sim 300 \text{ Tage.} \quad (4.19)$$

Dies beschreibt die Beobachtungen allerdings nicht gut: Man sieht einen sogenannten *Chandler-Wobble* statt einer sauberen Präzession. Gründe dafür sind beispielsweise die Jahreszeiten und die Deformierbarkeit der Erde.

## 4.4 Schwerer Kreisel - vereinfacht

Sei  $S'$  eine Symmetrieachse durch den Schwerpunkt und einen im Ursprung fixierten Punkt des Kreisels (Abb. 21). Wir arbeiten im raumfesten (gestrichelten) System und machen die zentrale, vereinfachende Annahme (Näherung), dass  $\bar{L}' \parallel \bar{S}'$ . Wenn eine Kraft, typischerweise die Schwerkraft, am Schwerpunkt angreift, folgt wegen  $\bar{M}' = \bar{r}' \times \bar{F}' \sim \bar{S}' \times \bar{F}'$ , dass im Rahmen unserer Näherung

$$\bar{L}' \perp \bar{M}' \quad (4.20)$$

gilt.

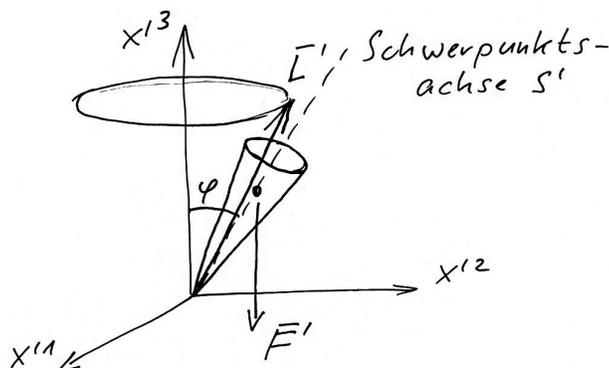


Abbildung 21: Der Schwere Kreisel.

Mit

$$(\bar{L}'^2) \cdot = 2\bar{L}' \cdot \dot{\bar{L}}' \quad \text{und} \quad \dot{\bar{L}}' = \bar{M}' \quad (4.21)$$

folgt daraus

$$|\bar{L}'| = \text{const.} \quad (4.22)$$

Weiterhin liegt, wegen  $\bar{F}' \parallel \hat{e}_3$ , das Drehmoment  $\bar{M}'$  stets in der  $x^1$ - $x^2$ -Ebene. Daraus folgt, dass sich die Spitze von  $\bar{L}'$  auf einem Kreis in einer Ebene bewegt, welche zur  $x^1$ - $x^2$ -Ebene parallel ist. Dabei gilt

$$\text{Kreisradius} = |\bar{L}'| \sin(\varphi) \quad \text{und} \quad \text{Geschwindigkeit} = |\bar{M}'|. \quad (4.23)$$

Die Periodendauer ergibt sich als

$$T = \frac{2\pi R}{v} = \frac{2\pi |\bar{L}'| \sin(\varphi)}{|\bar{M}'|} = \frac{2\pi |\bar{L}'|}{mgl}, \quad (4.24)$$

wobei wir noch den Abstand  $l$  zwischen festem Punkt und Schwerpunkt eingeführt haben.

Bei der Erde ist die Situation etwas anders: Es gibt keinen 'festen Punkt' und ein Drehmoment wird stattdessen (wegen der Abflachung der Erde und der Neigung ihrer Achse) durch die Gravitationskraft von Sonne und Mond verursacht, vgl. Abb. 22. Dies führt zur Präzession der Äquinoktialpunkte<sup>9</sup> (precession of equinoxes) mit  $T \sim 26.000a$ .

<sup>9</sup> Diese sogenannten Tagundnachtgleichen sind die beiden Zeitpunkte im Jahr, an denen die Äquato-

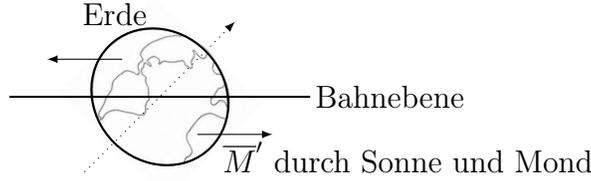


Abbildung 22: Die Erde – Drehmomente durch Sonne und Mond.

## 4.5 Eulerschen Winkel (M)

Um den schweren Kreisel exakt zu analysieren, müssen wir lernen, die relative Lage zweier Koordinatensysteme zu parametrisieren. Dies ist unabhängig vom Kreisel sehr wichtig, u.a. weil es der allgemeinen Parametrisierung einer Drehmatrix (also eines Elements von  $SO(3)$ ) entspricht.

Die Parametrisierung geschieht durch drei aufeinanderfolgende Drehungen, wie in Abb. 23 dargestellt. Obwohl es dazu noch viel zu sagen gäbe, begnügen wir uns mit dieser Definition.

Wichtig ist in unserem Zusammenhang noch, dass sich kleine Drehungen additiv verhalten – man kann die entsprechenden  $\delta\varphi$  einfach addieren. (Das folgt aus der Multiplikativität der entsprechenden Drehmatrizen, welche jeweils die Form  $R = \mathbb{1} + \mathcal{O}(\delta\varphi)$  haben.) Wegen dieser Additivität addieren sich auch Winkelgeschwindigkeiten, es gilt also

$$\bar{\omega}' = \dot{\varphi}\hat{e}'_3 + \dot{\psi}\hat{e}_3 + \dot{\theta}\hat{e}_N, \quad (4.25)$$

wobei  $\bar{\omega}'$  ein abstrakter Vektor ist.

## 4.6 Schwerer Kreisel – exakt

Man spricht hier auch vom **symmetrischen schweren Kreisel** oder auch **symmetrischen Kreisel im Schwerfeld** oder **Lagrange'schen Kreisel**. Wie gehabt sei nun das ungestrichene System  $S$  fest verbunden mit unserem symmetrischen Kreisel ( $I_1 = I_2 = I_0$ ). Es gilt

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} [I_0 \{(\omega^1)^2 + (\omega^2)^2\} + I_3(\omega^3)^2] - mgl \cos(\theta). \quad (4.26)$$

Wegen der Rotationssymmetrie des Schwerfeldes und des Kreisels sind  $\varphi$  und  $\psi$  zyklisch. Wir können die für uns notwendige Umschreibung

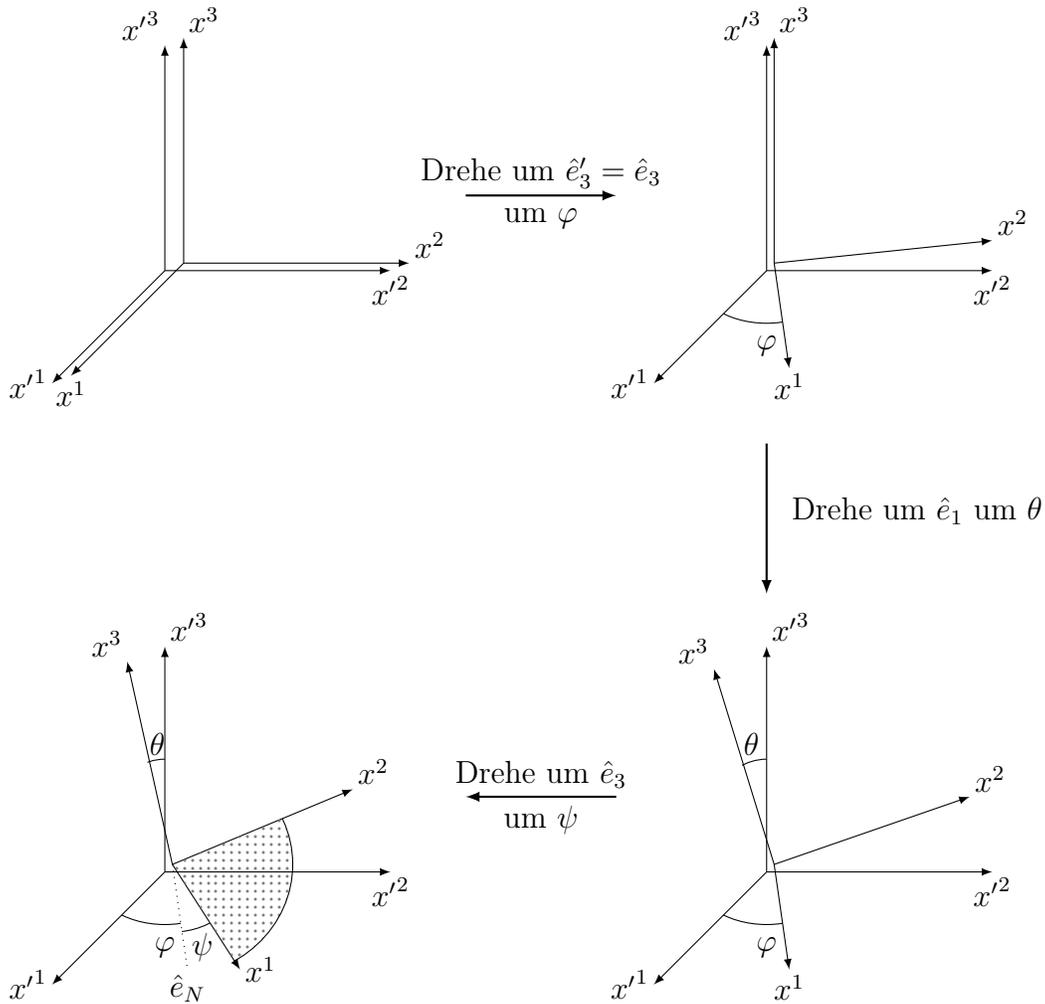
$$\{\omega^1, \omega^2, \omega^3\} \rightarrow \{\varphi, \psi, \theta, \dot{\varphi}, \dot{\psi}, \dot{\theta}\} \quad (4.27)$$

also bei  $\varphi = \psi = 0$  durchführen. Wir haben dann  $\hat{e}_N = \hat{e}_1$  und  $\hat{e}'_3 = \hat{e}_3 \cdot \cos(\theta) + \hat{e}_2 \cdot \sin(\theta)$ . Also gilt

$$\bar{\omega}' = \dot{\varphi}(\hat{e}_3 \cos(\theta) + \hat{e}_2 \sin(\theta)) + \dot{\psi}\hat{e}_3 + \dot{\theta}\hat{e}_1. \quad (4.28)$$

---

rialebene der Erde die Sonne trifft. Ihre zeitliche Verschiebung geht, wie man sich leicht überlegt, mit der Präzession der Erdachse einher.



$\hat{e}_N \parallel$  (Schnittgerade zwischen der  $x^1$ - $x^2$  und  $x'^1$ - $x'^2$ -Ebene)

Abbildung 23: Definition der Eulerschen Winkel.

Damit folgt

$$\begin{aligned}
 \omega^1 &= \dot{\theta} \\
 \omega^2 &= \dot{\varphi} \sin(\theta) \\
 \omega^3 &= \dot{\psi} + \dot{\varphi} \cos(\theta)
 \end{aligned}
 \tag{4.29}$$

und

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left[ I_0 \left( \dot{\theta}^2 + \dot{\varphi}^2 \sin^2(\theta) \right) + I_3 \left( \dot{\psi} + \dot{\varphi} \cos(\theta) \right)^2 \right] - m g l \cos(\theta).
 \tag{4.30}$$

Entscheidend ist, dass dies auch bei  $\varphi, \psi \neq 0$  gilt.

Oben haben wir  $T$  und  $V$  in den von uns gewünschten Koordinaten, den Euler-Winkeln, gegeben. Wir können also sofort die Energieerhaltungs-Gleichung

$$E = T + V = \text{const}_1
 \tag{4.31}$$

hinschreiben. Des Weiteren können wir

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}} = L^3 = \text{const}_2 \quad \text{und} \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = L^3 = \text{const}_3 \quad (4.32)$$

nutzen, um  $\dot{\varphi}$  und  $\dot{\psi}$  aus der Energieerhaltungsgleichung zu eliminieren.

Nun definieren wir  $u \equiv \cos(\theta)$  und haben damit ein effektives 1-dimensionales Problem mit

$$E = \frac{1}{2} I_0 \cdot \frac{\dot{u}^2}{1 - u^2} + V_{eff}(u) \quad (4.33)$$

und

$$V_{eff}(u) = m g l u + \frac{(L^3)^2}{2I_3} + \frac{(L^3 - L^3 u)^2}{2I_0(1 - u^2)}. \quad (4.34)$$

Das Nachrechnen dieser Formeln überlassen wir den Übungen.

Man kann die Energieerhaltung als

$$-\dot{u}^2 = \frac{2}{I_0} \left\{ \left( m g l u + \frac{(L^3)^2}{2I_3} - E \right) (1 - u^2) + \frac{(L^3 - L^3 u)^2}{2I_0} \right\} \equiv P(u) \quad (4.35)$$

umschreiben und das Polynom 3. Grades  $P$  auf der rechten Seite qualitativ analysieren, vgl. Abb. 24. Man sieht sofort, dass  $P(1)$  und  $P(-1)$  positiv sind. Außerdem hat man  $P(u) \rightarrow \mp \infty$  für  $u \rightarrow \pm \infty$ . Physikalisch zugänglich sind nur Bereiche, in denen  $P(u) < 0$ . Aufgrund der Definition  $u = \cos(\theta)$  ist auch klar, dass nur Werte von  $u$  zwischen  $-1$  und  $+1$  physikalisch relevant sind. Damit ergibt sich, dass  $P(u)$  im physikalischen Fall eine Form wie in der Abbildung annehmen muss: mit einem zwischen  $-1$  und  $+1$  liegenden Bereich mit Werten  $\lesssim 0$ . Im Bild liegt dieser Bereich oberhalb von  $u = 0$ , wie es für eine typischen, auf einem Tisch stehenden Kreisel der Fall wäre. Aber prinzipiell könnte der physikalische Bereich von  $u$  (mit negativem  $P(u)$ ) irgendwo zwischen  $u = -1$  und  $u = +1$  liegen. Man bräuchte nur eine Fixierung des Kreisels, die so eine Bewegung zulässt.

Alternativ kann man auch direkt die funktionale Form des effektiven Potentials analysieren, vgl. Abb. 25. Der Faktor  $1/(1 - u^2)$ , der diese beiden Größen verbindet, ist im interessanten Gebiet positiv. Deshalb entspricht der physikalische Bereich wieder (was auch aus der Forderung  $T > 0$  folgt) einer im Negativen liegenden ‘Mulde’ im zweiten Bild. Sie ist begrenzt von zwei Umkehrpunkten, an denen  $\dot{u} = 0$  und sich bei der physikalischen Bewegung das Vorzeichen von  $\dot{u}$  ändert.

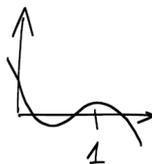


Abbildung 24: Polynom 3. Grades, welches  $-\dot{u}^2$  beschreibt.

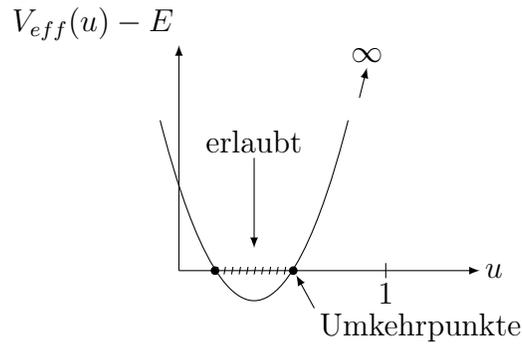


Abbildung 25: Effektives Potential.

Es ist somit klar, dass  $u$  zwischen zwei Werten  $u_{min}$  und  $u_{max}$  oszilliert. Demnach oszilliert  $\theta$  zwischen entsprechenden Werten  $\theta_{min}$  und  $\theta_{max}$ . Währenddessen schreitet  $\varphi$  (ungleichmäßig) voran, vgl. Abb. 26. Die entsprechende Formel,

$$\dot{\varphi} = \frac{L'_3 - L_3 \cos(\theta)}{I_0 \sin^2(\theta)}, \quad (4.36)$$

ergibt sich beim Berechnen von  $\dot{\varphi}$  aus (4.32), was wir oben schon benutzt aber noch nicht explizit hingeschrieben hatten.

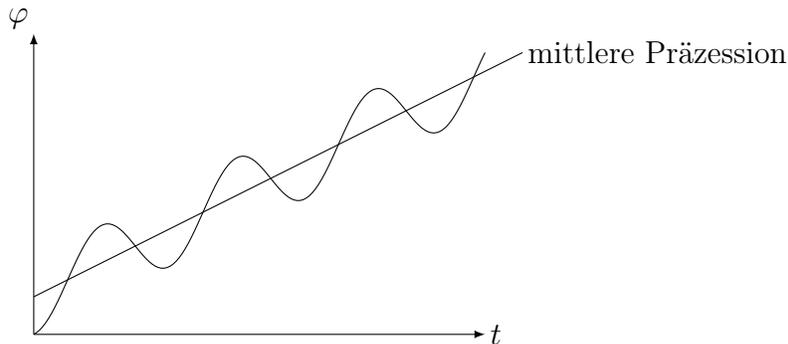


Abbildung 26:  $\varphi(t)$ -Diagramm für den Schweren Kreisel.

Verschiedene mögliche Kreiselbahnen sind in Abb. 27 skizziert.

## 5 D'Alembertsches Prinzip und Lagrange-Gleichungen 1. und 2. Art

Dies ist eine teils historisch motivierte "Herleitung" der Euler-Lagrange-Gleichungen aus der Newtonschen Mechanik. Nach wie vor aktuell sind jedoch der Teil zu nichtholonomen Zwangsbedingungen und die Lagrange-Gleichungen erster Art.

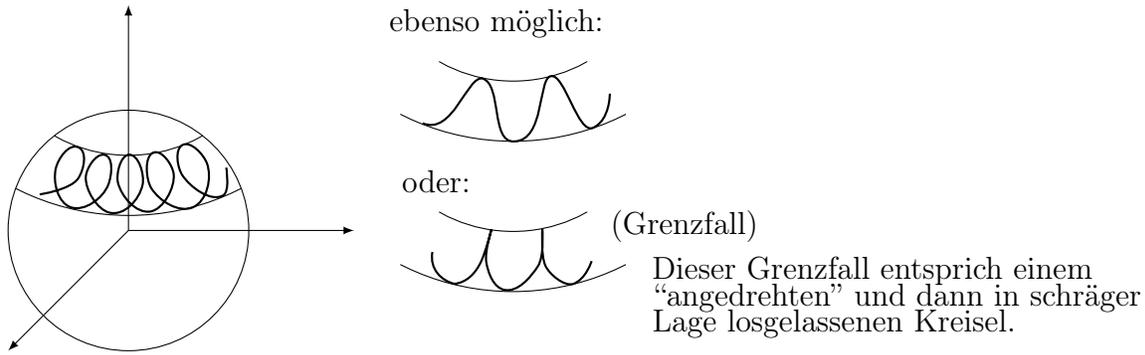


Abbildung 27: Kreiselbewegung, dargestellt auf Sphäre um den festen Punkt (Fußpunkt).

## 5.1 Arten von Zwangsbedingungen

Ganz informell ausgedrückt sind Zwangsbedingungen (oder ‘Zwänge’) Einschränkungen der Bewegungsfreiheit eines mechanischen Systems. Wird das System durch verallgemeinerte Koordinaten  $q_i$  (im einfachstem Fall die kartesischen Koordinaten der relevanten Massenpunkte) beschrieben, so bedeutet dies, dass entweder die Werte der  $q_i$  oder ihre erlaubten differentiellen Änderungen  $dq_i$  eingeschränkt werden.

Wir beginnen mit ein paar Beispielen für Zwangsbedingungen:

- (1) Gasmoleküle in einem Kasten
- (2a) Perle auf Draht, Draht unbewegt im Raum
- (2a) Perle auf Draht, Draht wird bewegt
- (3) Senkrecht auf Fläche stehendes Rad, das Rollen aber nicht rutschen kann
- (4) Durch masselose Stange verbundene Punktmassen (unser Modell für den starren Körper aus der Theoretischen Physik I).

Zur Klassifikation bemerken wir zunächst, dass Zwänge **holonom** heißen, falls sie als (nicht-differentielle) Gleichungen, also etwa als

$$\phi_\alpha(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N, t) = 0 \quad (\alpha = 1, \dots, d) \quad (5.1)$$

formulierbar sind. Falls  $t$  vorkommt, heißen sie darüberhinaus **rheonom** (vgl. Fall (2b)), sonst **skleronom** ((2a) und (4)). Unter den **nicht holomenen** Zwangsbedingungen sind besonders Zwänge in **differentieller, nicht integrierbarer Form** (vgl. Fall (3)) interessant. Dies diskutieren wir gleich genauer. Das einzige der obigen Beispiele, das nicht in diese Klassifikation passt, ist (1). Dazu werden wir auch in der Tat im gegenwärtigen Kapitel nichts weiter zu sagen haben.

Nun kommen wir, wie versprochen, in größerem Detail zum Fall (3): Die Lage kann, wie in Abb. 28 dargestellt, zunächst durch die 4 Parameter  $(\bar{x}, \varphi, \theta)$  beschrieben werden. Da wir fordern, dass das Rad nicht rutscht, ergeben sich die **differentiellen** Zwänge

$$dx^1 = R \cdot d\varphi \cdot \cos(\theta) \quad , \quad dx^2 = R \cdot d\varphi \cdot \sin(\theta) . \quad (5.2)$$

Man könnte nun hoffen, dass sich (wenigstens eine) dieser Bedingungen durch eine nicht-differentielle Gleichung der Form

$$\phi(x^1, x^2, \varphi, \theta) = 0 \quad (5.3)$$

ersetzen lässt. Unter ‘Ersetzen’ verstehen wir hierbei, dass Differenzieren der Gleichung eine der obigen differentiellen Beziehungen zurückgibt:

$$0 = d\phi = \frac{\partial\phi}{\partial x^1} dx^1 + \frac{\partial\phi}{\partial x^2} dx^2 + \frac{\partial\phi}{\partial\varphi} d\varphi + \frac{\partial\phi}{\partial\theta} d\theta.$$

Falls das sogar für beide Zwänge ginge, wären diese eben doch nicht ‘**nicht-integrierbar**’. Wir wären dann in versteckter Weise doch im holonomen Fall.

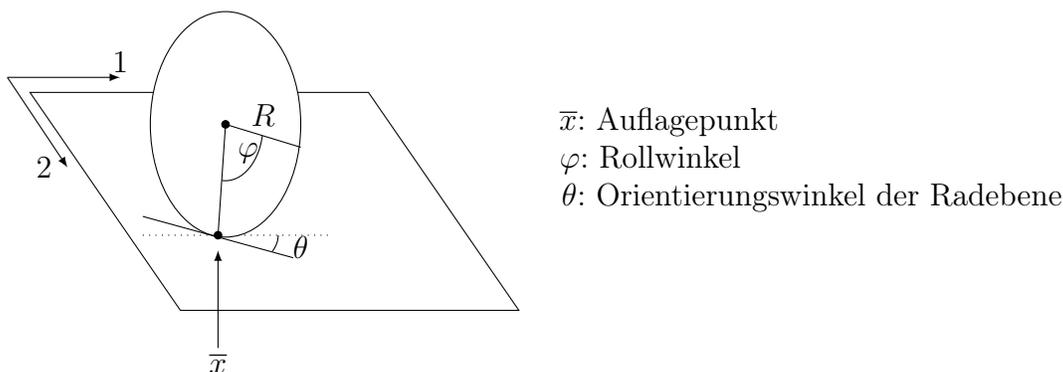


Abbildung 28: Auf einer Ebene rollendes Rad.

Im konkreten Beispiel ist dies aber unmöglich. Falls es nämlich ginge, dann könnte man die gefundene Gleichung z.B. nach  $\varphi$  auflösen  $\varphi = \varphi(x^1, x^2, \theta)$ . Dies stünde aber im Widerspruch zur möglichen Bewegung des Rades, welches man offensichtlich durch ein ‘Herumrollen’ auf einem kleineren oder größeren Kreis zum **gleichen**  $(x^1, x^2, \theta)$  bei **beliebigem**  $\varphi$  zurückführen kann.

Der Name holonom erklärt sich aus der Bedeutung ‘ganz’ oder ‘integer’ (lateinisch) des Stammes ‘holos’ (griechisch). Nicht-holonom heißt also nicht-integrierbar, wie eben am Beispiel erklärt.

## 5.2 Prinzip der virtuellen Arbeit und d’Alembertsches Prinzip

In vielen Fällen verrichten Zwangskräfte keine Arbeit. Betrachten wir dazu zunächst den Fall **masseloser, starrer Stangen**, vgl. Abb. 29. Wir bezeichnen die Zwangskräfte als  $\overline{F}^C$ , wobei  $C$  für constraint = Zwang steht.

Wir haben für dieses System mittels des dritten Newtonschen Axioms schon gezeigt, dass Energieerhaltung gilt und demnach

$$\delta A = \overline{F}_{12}^C \cdot d\bar{x}_1 + \overline{F}_{21}^C \cdot d\bar{x}_2 = 0. \quad (5.4)$$

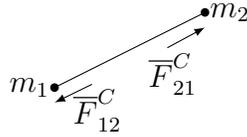


Abbildung 29: Zwangskräfte bei masselosen Stangen

Ein weiteres Beispiel ist die **Perle auf einem Draht**, vgl. Abb. 29. Hierbei steht  $\bar{F}_C$  immer senkrecht zum Draht und damit zu  $d\bar{x}$ . Daraus folgt

$$\delta A = \bar{F}^C \cdot d\bar{x} = 0, \quad (5.5)$$

wie behauptet.

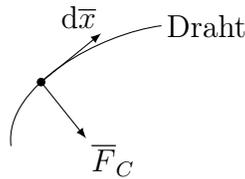


Abbildung 30: Zwangskräfte bei einer Perle auf einem Draht.

Wir wollen die Behauptung ‘Zwangskräfte verrichten keine Arbeit’ so allgemein wie möglich formulieren, stoßen aber sofort auf ein Problem. In der Tat ist nämlich auch der Fall des bewegten Drahtes interessant, aber in diesem Fall kann  $d\bar{x}$  einen Anteil orthogonal zum Draht haben und  $\delta A = 0$  gilt i.A. nicht mehr.

Wir lösen dieses Problem durch die Definition der **virtuellen Verrückung**: Dies ist eine gedachte, kleine Verrückung des Systems bei  $t = \text{const.}$ , welche mit den Zwängen konsistent ist. Sie stellt **keine** echte Bewegung dar. Für solche virtuelle Verrückungen ist in allen oben angesprochenen Beispielen (einschließlich der Perle auf einem bewegten Draht) die von den Zwangskräften verrichtete Arbeit gleich Null.

Mehr noch, wir formulieren unsere Behauptung als **Prinzip der virtuellen Arbeit**, welches besagt, dass

$$\sum_a \bar{F}_a^C \cdot \delta \bar{x}_a = 0 \quad (5.6)$$

für jede virtuelle Verrückung  $\delta \bar{x}_a$ , ( $a = 1, \dots, N$ ) gelten soll. Wir können dies als **Definition eines ‘glatt geführten Systems’** betrachten.

Für jede der Punktmassen unseres Systems gilt nun

$$\bar{F}_a^{\text{tot}} = \bar{F}_a + \bar{F}_a^C, \quad (5.7)$$

wobei  $\bar{F}_a$  die äußeren Kräfte bezeichnet. Also folgt

$$\sum_a \left( \bar{F}_a - \bar{F}_a^{\text{tot}} \right) \cdot \delta \bar{x}_a = 0 \quad (5.8)$$

oder, mit Newton,

$$\sum_a (\bar{F}_a - m_a \ddot{\bar{x}}_a) \cdot \delta \bar{x}_a = 0. \quad (5.9)$$

Diese Gleichung bezeichnet man als **d'Alembertsches Prinzip**. Es ist, wie wir eben gesehen haben, zum Prinzip der virtuellen Arbeit äquivalent, hat aber den Vorteil, dass keine Zwangskräfte sondern nur die äußeren Kräfte  $\bar{F}_a$  und die virtuelle Verrückung  $\delta \bar{x}_a$  unseres "glatt geführten Systems" auftreten.

Als **nützliches Korollar** ergibt sich, dass im Gleichgewicht stets

$$\sum_a \bar{F}_a \cdot \delta \bar{x}_a = 0 \quad (5.10)$$

gelten muss.

Wir demonstrieren dies am Beispiel einer Wippe (vgl. Abb. 31), wo offensichtlich

$$\delta x_2 = -\frac{l_2}{l_1} \delta x_1$$

gilt. Wir setzen dies in das d'Alembertsche Prinzip für den Gleichgewichtsfall,

$$F_1 \delta x_1 + F_2 \delta x_2 = 0, \quad (5.11)$$

ein und finden

$$F_1 \delta x_1 + F_2 \left(-\frac{l_2}{l_1}\right) \delta x_1 = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{F_1}{F_2} = \frac{l_2}{l_1}. \quad (5.12)$$

Die letzte Beziehung ist als Hebelgesetz wohlbekannt.

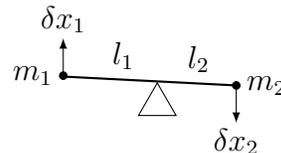


Abbildung 31: Wippe.

### 5.3 D'Alembertsches Prinzip mit verallgemeinerten Koordinaten und Kräften

Wir betrachten nun ein System von  $N$  Massenpunkten mit  $d$  holonomen Zwängen, also

$$\phi_\alpha(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N, t) \quad \alpha = 1, \dots, d. \quad (5.13)$$

Es ist vorteilhaft, mit verallgemeinerten Koordinaten  $q_m$  zu arbeiten, sodass

$$\bar{x}_a = \bar{x}_a(q_1, \dots, q_{3N-d}, t), \quad (5.14)$$

wobei die  $q_m$  keinen Zwängen unterliegen. Laut d'Alembert gilt

$$\sum_a (\bar{F}_a - m_a \ddot{\bar{x}}_a) \delta \bar{x}_a = 0, \quad (5.15)$$

wobei aber die  $\delta \bar{x}_a$  so zu wählen sind, dass die Zwänge respektiert werden. In verallgemeinerten Koordinaten können wir allerdings

$$\delta \bar{x}_a = \sum_m \frac{\partial \bar{x}_a}{\partial q_m} \delta q_m \quad (5.16)$$

schreiben. Im Gegensatz zu den  $\delta \bar{x}_a$  sind die  $\delta q_m$  beliebig: Zwangsbedingungen für die  $\delta \bar{x}$  werden mit (5.16) automatisch respektiert.

Wir wollen jetzt das d'Alembertsche Prinzip in den  $\delta q_m$  umschreiben. Für den ersten Term finden wir

$$\sum_a \bar{F}_a \cdot \delta \bar{x}_a = \sum_{a,m} \bar{F}_a \cdot \frac{\partial \bar{x}_a}{\partial q_m} \delta q_m = \sum_m Q_m \delta q_m \quad (5.17)$$

wobei wir die **verallgemeinerten Kräfte**

$$Q_m \equiv \sum_a \bar{F}_a \cdot \frac{\partial \bar{x}_a}{\partial q_m} \quad (5.18)$$

eingeführt haben.

Jetzt wenden wir uns dem zweiten Term von d'Alembert zu, wobei wir zunächst die Summation über  $a$  und die  $m_a$ -Vorfaktoren unterdrücken:

$$\ddot{\bar{x}}_a \cdot \delta \bar{x}_a = \sum_m \ddot{\bar{x}}_a \cdot \frac{\partial \bar{x}_a}{\partial q_m} \delta q_m = \sum_m \left( \underbrace{\frac{d}{dt} \left( \dot{\bar{x}}_a \cdot \frac{\partial \bar{x}_a}{\partial q_m} \right)}_{\text{liefert 2 Terme}} - \underbrace{\dot{\bar{x}}_a \cdot \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \bar{x}_a}{\partial q_m} \right)}_{\text{wieder abziehen des zweiten Terms}} \right) \delta q_m. \quad (5.19)$$

An dieser Stelle ist eine kurze Nebenrechnungen sinnvoll, die wir zur Vereinfachung ohne Indizes durchführen: Uns ist die Funktion (eigentlich ein Satz von Funktionen)  $x = x(q, t)$  gegeben. Für deren totale Zeitableitung gilt

$$\dot{x} = \frac{\partial x}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial x}{\partial t} \equiv \dot{x}(q, \dot{q}, t), \quad (5.20)$$

wobei wir im letzten Schritt die Funktion  $\dot{x}(q, \dot{q}, t)$  definiert haben. Gemäß dieser Definition gilt offensichtlich

$$\frac{\partial \dot{x}}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial x}{\partial q}. \quad (5.21)$$

Des Weiteren berechnen wir

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial x}{\partial q} \right) = \frac{\partial^2 x}{\partial q^2} \dot{q} + \frac{\partial^2 x}{\partial q \partial t} \quad (5.22)$$

und (unter Berufung auf (5.20))

$$\frac{\partial \dot{x}}{\partial q} = \frac{\partial^2 x}{\partial q^2} \dot{q} + \frac{\partial^2 x}{\partial q \partial t}. \quad (5.23)$$

Da die rechten Seiten übereinstimmen, müssen dies auch die linken Seiten tun:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial x}{\partial q} \right) = \frac{\partial \dot{x}}{\partial q}. \quad (5.24)$$

Unter Anwendung von (5.21) und (5.24) können wir jetzt (5.19) zu

$$\ddot{x}_a \delta \bar{x}_a = \sum_m \left( \frac{d}{dt} \left( \dot{x}_a \cdot \frac{\partial \dot{x}_a}{\partial \dot{q}_m} \right) - \dot{x}_a \cdot \frac{\partial \dot{x}_a}{\partial q_m} \right) \delta q_m \quad (5.25)$$

umformen. Jetzt vervollständigen wir zu

$$\begin{aligned} \sum_a m_a \ddot{x}_a \delta \bar{x}_a &= \sum_{a,m} m_a \left( \frac{d}{dt} \left( \dot{x}_a \cdot \frac{\partial \dot{x}_a}{\partial \dot{q}_m} \right) - \dot{x}_a \cdot \frac{\partial \dot{x}_a}{\partial q_m} \right) \delta q_m \\ &= \sum_{a,m} m_a \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_m} \left( \frac{1}{2} \dot{x}_a^2 \right) - \frac{\partial}{\partial q_m} \left( \frac{1}{2} \dot{x}_a^2 \right) \right) \delta q_m. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Schließlich setzen wir diese Gleichung zusammen mit (5.17) in (5.15) ein und finden mit der üblichen Definition der kinetischen Energie,

$$T = \sum_a \frac{m_a}{2} \dot{x}_a^2, \quad (5.27)$$

unser Gesamtergebnis:

$$\sum_m \left( Q_m - \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_m} - \frac{\partial}{\partial q_m} \right) T \right) \delta q_m = 0. \quad (5.28)$$

Dies ist das **d'Alembertsche Prinzip in verallgemeinerten Koordinaten**. Da die  $\delta q_m$  beliebig sind, impliziert die Null auf der rechten Seite, dass der Ausdruck in den äußeren Klammern für jedes  $m$  einzeln verschwindet. Wir erhalten so  $(3N-d)$  Differentialgleichungen für die  $(3N-d)$  Variablen  $q_m$ . Probleme mit holonomen Zwängen sind damit prinzipiell gelöst.

## 5.4 Lagrange-Gleichungen 1. Art

Die verallgemeinerten Koordinaten seien nun zusätzlich nichtholonomen differentiellen Zwangsbedingungen unterworfen,

$$\sum_m f_m^\alpha dq_m + f_t^\alpha dt = 0, \quad \alpha = 1, \dots, p, \quad (5.29)$$

wobei die  $f^\alpha$  Funktionen der  $q_m$  und von  $t$  sind. Wir wollen im Folgenden

$$\delta\bar{q} \equiv \{\delta q_m\}, \quad \bar{f}^\alpha \equiv \{f_m^\alpha\} \quad \text{und} \quad \bar{\pi} \equiv \left\{ Q_m - \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_m} - \frac{\partial}{\partial q_m} \right) T \right\} \quad (5.30)$$

als Vektoren in  $\mathbb{R}^{3N-d}$  betrachten, wobei  $d$  wie schon früher die Anzahl der holonomen Zwangsbedingungen bezeichnet. In dieser Sprache vereinfachen sich die differentiellen Zwangsbedingungen für virtuelle Verrückungen (also mit  $dq \rightarrow \delta q$  und  $dt = 0$ ) zu

$$\bar{f}^\alpha \cdot \delta\bar{q} = 0 \quad \forall \alpha. \quad (5.31)$$

Außerdem wollen wir mit  $\text{Span}\{\bar{f}^\alpha\}$  den linearen Untervektorraum in  $\mathbb{R}^{3N-d}$  bezeichnen, welcher von den  $\bar{f}^\alpha$  aufgespannt wird. Sein orthogonales Komplement nennen wir  $\text{Span}\{\bar{f}^\alpha\}_\perp$ . In dieser Sprache können wir (5.31) als

$$\delta\bar{q} \in \text{Span}\{\bar{f}^\alpha\}_\perp \quad (5.32)$$

formulieren. Dies definiert die erlaubten virtuellen Verrückungen. Wir können auch schreiben

$$\{\delta\bar{q}\} = \text{Span}\{\bar{f}^\alpha\}_\perp. \quad (5.33)$$

D'Alembert besagt nun

$$\bar{\pi} \cdot \delta\bar{q} = 0 \quad (5.34)$$

oder, was dasselbe ist,

$$\bar{\pi} \in \{\delta\bar{q}\}_\perp. \quad (5.35)$$

Damit folgt dann

$$\bar{\pi} \in \{\text{Span}\{\bar{f}^\alpha\}_\perp\}_\perp = \text{Span}\{\bar{f}^\alpha\}. \quad (5.36)$$

Da dies nun zu jedem Zeitpunkt gilt, müssen Funktion  $\lambda^\alpha(t)$  (sogenannte Lagrange-Multiplikatoren) existieren, so dass:

$$\begin{aligned} Q_m - \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_m} - \frac{\partial}{\partial q_m} \right) T + \sum_\alpha \lambda^\alpha f_m^\alpha &= 0 \\ \sum_m f_m^\alpha \dot{q}_m + f_t^\alpha &= 0. \end{aligned} \quad (5.37)$$

Dieses System von  $(3N - d) + p$  Differentialgleichungen für die  $(3N - d) + p$  Funktionen  $q_m$  und  $\lambda^\alpha$  bezeichnet man als **Lagrange-Gleichungen 1. Art**. Unser Problem ist damit prinzipiell gelöst.

## 5.5 Lagrange-Multiplikatoren und Zwangskräfte

Aus der Herleitung des d'Alembertschen Prinzips in verallgemeinerten Koordinaten 5.3 lässt sich folgendes technisches Zwischenergebnis extrahieren:

$$\left( \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_m} - \frac{\partial}{\partial q_m} \right) T = \sum_a m_a \ddot{x}_a \cdot \frac{\partial \bar{x}_a}{\partial q_m}. \quad (5.38)$$

Mit

$$m_a \ddot{\bar{x}}_a = \bar{F}_a^{tot} = \bar{F}_a + \bar{F}_a^C \quad (5.39)$$

und den Definitionen

$$Q_m \equiv \sum_a \bar{F}_a \cdot \frac{\partial \bar{x}_a}{\partial q_m} \quad (5.40)$$

und

$$Q_m^C \equiv \sum_a \bar{F}_a^C \cdot \frac{\partial \bar{x}_a}{\partial q_m} \quad (5.41)$$

der verallgemeinerten echten und Zwangskräfte folgt daraus

$$\left( \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_m} - \frac{\partial}{\partial q_m} \right) T = Q_m + Q_m^C. \quad (5.42)$$

Wenn wir dies in die Lagrange-Gleichungen 1. Art,

$$Q_m - \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_m} - \frac{\partial}{\partial q_m} \right) T + \sum_\alpha \lambda^\alpha f_m^\alpha = 0, \quad (5.43)$$

einsetzen, ergibt sich:

$$Q_m^C = \sum_\alpha \lambda^\alpha f_m^\alpha. \quad (5.44)$$

Die Lagrange-Multiplikatoren bestimmen demnach die verallgemeinerten Zwangskräfte.

Als Schlusskommentar gehen wir noch explizit auf den einfacheren Spezialfall ein, in dem es keine (im ersten Schritt zu eliminierenden) holonomen Zwänge gibt. Man kann dann die Lagrangegleichungen 1. Art auch direkt in kartesischen Koordinaten formulieren und erhält

$$F_m - m_m \ddot{x}_m + \sum_\alpha \lambda^\alpha f_m^\alpha = 0 \quad (5.45)$$

$$\sum_{m=1}^{3N} f_m^\alpha \dot{x}_m + f_t^\alpha = 0 \quad (5.46)$$

für  $m = 1, \dots, 3N$ . Der Index  $m$  läuft über alle kartesischen Koordinaten aller  $N$  Teilchen, so dass die  $m_m$  jeweils in Dreiergruppen gleich sind. Unsere eben hergeleitete Formel für die Zwangskräfte lautet jetzt

$$F_m^C = \sum_\alpha \lambda^\alpha f_m^\alpha. \quad (5.47)$$

## 5.6 Lagrange-Gleichungen 2. Art

Betrachten wir nun ein System mit verallgemeinerten Koordinaten  $q_m$  ohne zusätzliche nichtholonome Zwänge. Die äußeren Kräfte seien konservativ:

$$\bar{F}_a = -\bar{\nabla}_a V(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N), \quad (5.48)$$

wobei  $\bar{\nabla}_a \equiv$  den Gradienten bezüglich  $\bar{x}_a$  bezeichne.

Für die verallgemeinerten Kräfte gilt

$$Q_m = \sum_a \bar{F}_a \cdot \frac{\partial \bar{x}_a}{\partial q_m} = - \sum_a (\bar{\nabla}_a V) \cdot \frac{\partial \bar{x}_a}{\partial q_m} = - \frac{\partial V}{\partial q_m} = \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_m} - \frac{\partial}{\partial q_m} \right) V. \quad (5.49)$$

Wir haben hier im vorletzten Schritt  $V$  als  $V(\bar{x}(q))$  aufgefasst und im letzten Schritt benutzt, dass  $\partial V / (\partial \dot{q})$  trivialerweise verschwindet.

Wir erinnern uns nun an *d'Alembert in verallgemeinerten Koordinaten*, als an

$$Q_m - \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_m} - \frac{\partial}{\partial q_m} \right) T = 0. \quad (5.50)$$

Einsetzen der eben gefundenen Formel für  $Q_m$  liefert

$$\begin{aligned} \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_m} - \frac{\partial}{\partial q_m} \right) V - \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_m} - \frac{\partial}{\partial q_m} \right) T &= 0 \\ \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_m} - \frac{\partial}{\partial q_m} \right) (V - T) &= 0 \\ \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_m} - \frac{\partial}{\partial q_m} \right) L &= 0, \end{aligned} \quad (5.51)$$

mit  $L \equiv T - V$ . Damit haben wir die weiter oben aus dem Wirkungsprinzip abgeleiteten Euler-Lagrange-Gleichungen (auch als Lagrange-Gleichungen 2. Art bekannt) nun auch aus Newton gewonnen. Voraussetzung waren die Beschränkung auf 'glatt geführte Systeme' und auf konservative äußere Kräfte.

## 5.7 Lagrange-Multiplikatoren – allgemeine Sicht

Stellen wir uns eine durch die Höhenfunktion  $f(x, y)$  beschriebene Gebirgslandschaft vor. Um den Gipfel zu finden, müssen wir diese gleichzeitig in  $x$  und  $y$  extremalisieren. Wir müssen also

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial f}{\partial y} = 0 \quad (5.52)$$

gleichzeitig lösen.

Nun interessiert uns aber nicht der Gipfel sondern der höchste Punkt auf einem gewissen Weg, also der Pass. Der fragliche Weg sei durch

$$g(x, y) = 0 \quad (5.53)$$

beschrieben, vgl. Abb. 32. Dies stellt eine vereinfachte Version der von uns vorher diskutierten Zwangsbedingungen in einem mechanische System dar.

Wir haben nun offensichtlich ein Problem, da (5.52) und (5.53) nicht gleichzeitig lösbar sind. Dies wäre in der Tat auch zu viel verlangt, weil der Weg ja i.A. nicht über den Gipfel führen wird.

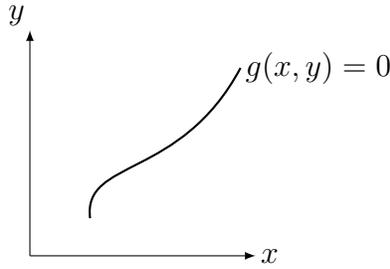


Abbildung 32: Extremalisierung einer Funktion  $f(x, y)$  entlang des Weges  $g(x, y) = 0$ .

Die Standard-Lösungsmethode benutzt einen sogenannten Lagrange-Multiplikator: Zunächst die **zentrale Behauptung**: Um  $f(x, y)$  entlang der Kurve  $g(x, y) = 0$  zu extremalisieren, müssen wir nur

$$\frac{\partial}{\partial x}(f + \lambda g) = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial y}(f + \lambda g) = 0 \quad (5.54)$$

sowie gleichzeitig

$$g(x, y) = 0 \quad \left( \text{äquivalenterweise: } \frac{\partial}{\partial \lambda}(f + \lambda g) = 0 \right) \quad (5.55)$$

lösen. Dies ist nun auch möglich, da wir drei Gleichungen für die drei Unbekannten  $x$ ,  $y$  und  $\lambda$  haben. Die Lösung sei  $(x_0, y_0, \lambda_0)$ , wobei  $(x_0, y_0)$  das gesuchte Extremum ist.

**Begründung:** Wir müssen natürlich prüfen, dass unser eigentliches Problem tatsächlich gelöst ist. Dies ist aber einfach: Mit unserer Lösung  $\{x_0, y_0, \lambda_0\}$  liegt uns offensichtlich eine Funktion vor, nämlich  $f(x, y) + \lambda_0 g(x, y)$ , deren Extremum gerade auf dem Weg  $g(x, y) = 0$  liegt. Dieser Extremal-Punkt,  $(x_0, y_0)$ , ist ein Extremum von  $f + \lambda_0 g$  bezüglich aller  $(x, y)$ . Er ist also auch ein Extremum von  $f + \lambda_0 g$  bezüglich der Untermenge aller  $(x, y)$ , für die  $g = 0$  gilt. Auf diesem Weg ist aber  $f + \lambda_0 g = f$ . Es folgt, dass  $(x_0, y_0)$  ein Extremum der Funktion  $f$  bezüglich des durch  $g = 0$  definierten Weges ist.

Wir wollen jetzt noch klarstellen, dass wir bei unserer vorher diskutierten Herleitung der Lagrange-Gleichungen 1. Art genau diese Idee benutzt haben. Dazu beschränken wir uns auf den Fall einer nichtholonomen Zwangsbedingung  $\bar{f}$  mit  $f_t = 0$ . Wenn wir naiv herangehen, sollen in diesem Fall

$$\bar{\pi} \equiv \left\{ Q_m - \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_m} - \frac{\partial}{\partial q_m} \right) T \right\} = 0 \quad (5.56)$$

zusammen mit

$$\bar{f} \cdot \dot{\bar{q}} = 0 \quad (5.57)$$

lösen. Dies geht aber nicht, da wir jetzt mehr Differentialgleichungen als Variablen  $q_m$  haben. In der Tat sollen wir eigentlich auch nicht (5.56) sondern nur das Produkt mit den erlaubten virtuellen Verschiebungen  $\delta \bar{q}$  zum Verschwinden bringen.

Die Lösung liegt, ganz analog zum eben diskutierten Extremalisierungs-Problem, in der Einführung eines Lagrange-Multiplikators: Wir lösen

$$\bar{\pi} + \lambda \bar{f} = 0 \quad \text{und gleichzeitig} \quad \bar{f} \cdot \dot{\bar{q}} = 0. \quad (5.58)$$

Dies geht, da wir jetzt die zusätzliche Variable  $\lambda$  zur Verfügung haben, und es verschafft uns außerdem sogar noch die Zwangskraft.

Vergessen wir jetzt die nichtholonomen Zwangsbedingungen und das Extremalisierungs-Beispiel. Die wirklich spannenden Anwendungen sind vom Funktional-Typ:

Seien  $F[f], G[f]$  Funktionale. Wenn wir  $F$  mit der Nebenbedingung  $G = 0$  extremalisieren sollen, dann müssen wir einfach nur

$$F[f] + \lambda G[f] \tag{5.59}$$

bezüglich der Funktionen  $f$  und  $\lambda$  extremalisieren. Wir müssen  $G = 0$  nicht einmal zusätzlich fordern, da dies die Extremalisierung in  $\lambda$  schon garantiert:

$$0 = \delta_\lambda(F + \lambda G) = G. \tag{5.60}$$

Als konkretes Beispiel dazu betrachten wir den Fall, in dem uns eine Lagrange-Funktion  $L$  und eine zusätzliche holonome Zwangsbedingung  $f = 0$  gegeben ist. Nach dem eben Gesagten genügt es in diesem Fall, das Extremalisierungsproblem

$$\delta \int dt [L(\bar{x}, \dot{\bar{x}}, t) + \lambda(t)f(\bar{x})] = 0 \tag{5.61}$$

bezüglich der Funktionen  $\bar{x}(t)$  und  $\lambda(t)$  zu lösen.

## 6 Hamilton-Formalismus

Der Hamilton-Formalismus ermöglicht zunächst einmal eine Beschreibung der Dynamik durch Differentialgleichungen 1. Ordnung. Darüberhinaus ist er wichtig, weil er eine Umkehrung des Noether-Theorems ermöglicht (zu jeder Erhaltungsgröße gehört eine Symmetrie) und weil er Grundlage eines wichtigen Zugangs zur Quantenmechanik (der kanonischen Quantisierung) ist. Es ließe sich noch viel mehr sagen, doch das soll zunächst zur Motivation genügen.

### 6.1 Legendre-Transformationen (M)

Gegeben sei eine Funktion

$$f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \quad x \mapsto f(x) \tag{6.1}$$

Wir wollen in  $f$  kodierte Information anders darstellen, zum Beispiel in einer Funktion der Variable  $u \equiv f'(x)$ .

Man könnte dazu die Beziehung  $u \equiv f'(x)$  nach  $x$  auflösen, also eine Funktion  $x = x(u)$  als Inverses zu  $u = u(x) \equiv f'(x)$  definieren. Dann könnte man die ‘Transformierte Funktion’ als  $f(x(u))$  definieren.

Als ‘mathematisch natürlich’ erweist sich eine geringfügig andere Definition:

$$g(u) = x(u) \cdot u - f(x(u)). \tag{6.2}$$

Anders gesagt: Die **Legendre-Transformierte** zu einer Funktion  $x \mapsto f(x)$  ist die Funktion  $u \mapsto g(u)$  mit

$$g(u) = x \cdot u - f(x) \quad \text{wobei } x \text{ durch } u = f'(x) \quad (6.3)$$

definiert ist. Wir wollen immer fordern, dass  $f''(x) \neq 0$ , damit  $u = f'(x)$  nach  $x$  auflösbar ist.

Wir sammeln einige wichtige Fakten zur bzw. Eigenschaften der Legendre-Transformation:

- Wir zunächst stellen fest, dass stets  $g'(u) = x(u)$  gilt.

Das ist leicht zu prüfen:

$$g'(u) = \frac{d}{du} (x(u) \cdot u - f(x(u))) = x(u) + u \cdot \frac{d(x(u))}{du} - f'(x(u)) \cdot \frac{d(x(u))}{du} = x(u). \quad (6.4)$$

- Wenn  $g$  die Legendre-Transformierte zu  $f$  ist, dann sind  $f'$  und  $g'$  zueinander inverse Funktionen.

Dies haben wir bereits gezeigt, weil  $f'(g'(u)) = f'(x(u)) = u$  gilt. Wir bemerken auch, dass diese Eigenschaft oft als Definition der Legendre-Transformation benutzt wird. Sie impliziert auch, dass

- die Legendre-Transformation ist eine **Involution** ist. Sprich:  $\text{Leg}(\text{Leg}(f)) = f$ .

Wir prüfen dies explizit nach: Seien dazu  $f$ ,  $g$  und  $h$  so definiert, dass

$$f \xrightarrow{\text{Leg}} g \xrightarrow{\text{Leg}} h. \quad (6.5)$$

Es gilt also insbesondere  $h(z) = u \cdot z - g(u)$  mit  $z = g'(u)$ . Mit  $g'(u) = x$  folgt damit  $z = x$ . Weiterhin ergibt sich

$$h(z) = u \cdot x - (x \cdot u - f(x)) = f(x) = f(z), \quad (6.6)$$

wie behauptet.

Die Verallgemeinerung auf Funktionen mehrerer Variablen ist naheliegend: Sei eine Funktion  $f$  mit

$$f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \quad \bar{x} \mapsto f(\bar{x}) \quad (6.7)$$

gegeben. Die Legendere-Transformierte

$$g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \quad \bar{u} \mapsto g(\bar{u}) \quad (6.8)$$

ist dadurch definiert, dass

$$g(\bar{u}) = \bar{x}(\bar{u}) \cdot \bar{u} - f(\bar{x}(\bar{u})) \quad (6.9)$$

gelten soll, wobei  $\bar{x} = \bar{x}(\bar{u})$  durch

$$\bar{u} = \bar{\nabla} f(\bar{x}) \quad (6.10)$$

gegeben ist.

Es sei ohne Beweis angemerkt, dass wir zum Auflösen von (6.10) statt  $f'' \neq 0$  jetzt die Bedingung

$$\det \left( \frac{\partial^2 f}{\partial x^i \partial x^j} \right) \neq 0 \quad (6.11)$$

benötigen.

Schließlich geben wir noch zwei einfache explizite Beispiele. Das Erste ist die Parabel:

$$f(x) = x^2, \quad f'(x) = 2x = u, \quad x = \frac{u}{2} \quad (6.12)$$

und demnach

$$g(u) = x \cdot u - f(x) = \frac{u}{2} \cdot u - \left(\frac{u}{2}\right)^2 = \frac{u^2}{4}. \quad (6.13)$$

Das zweite die Exponentialfunktion:

$$f(x) = e^x, \quad f'(x) = e^x = u, \quad x = \ln(u) \quad (6.14)$$

und somit

$$g(u) = x \cdot u - f(x) = u \cdot \ln(u) - e^{\ln(u)} = u(\ln(u) - 1). \quad (6.15)$$

## 6.2 Hamilton-Funktion

Zurück zur Physik: Die Hamilton-Funktion  $H(q, p, t)$  eines Systems mit Lagrange-Funktion  $L(q, \dot{q}, t)$  ist als Legendre-Transformierte zu  $L$  in der Variablen  $\dot{q}$  definiert. Also:

$$H(q, p, t) \equiv p \cdot \dot{q} - L(q, \dot{q}, t) \quad (6.16)$$

wobei  $\dot{q} = \dot{q}(p, q, t)$  durch

$$p \equiv \frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}} \quad (6.17)$$

gegeben ist. Man nennt  $p$  den zu  $q$  **kanonisch konjugierten Impuls**.

Das einfachste und vielleicht wichtigste Beispiel ist<sup>10</sup>

$$L = \frac{1}{2}f(q) \cdot \dot{q}^2 - V(q). \quad (6.18)$$

Nach unserer Definition ist

$$p = f(q) \cdot \dot{q} \quad (6.19)$$

und somit

$$H = p \cdot \dot{q} - L = p \cdot \frac{p}{f(q)} - \frac{1}{2}f(q) \cdot \left(\frac{p}{f(q)}\right)^2 + V(q) = \frac{1}{2} \frac{p^2}{f(q)} + V(q) = T + V. \quad (6.20)$$

---

<sup>10</sup> Nur als Nebenbemerkung: Ein möglicher zusätzlicher Term  $g(q)\dot{q}$  tut der Allgemeinheit keinen Abbruch, da er eine totale Zeitableitung darstellt und weggelassen werden darf. Obwohl wir in obigem Beispiel keine Zeitabhängigkeit zugelassen haben, sei weiterhin bemerkt, dass dies sogar mit einem Term  $g(q, t)\dot{q}$  noch funktioniert: Man schreibe ihn um als  $[g(q, t)\dot{q} + (\partial/\partial t)G(q, t)] - (\partial/\partial t)G(q, t)$ , wobei  $G$  die Stammfunktion zu  $g$  bzgl.  $q$  ist, und prüfe, dass der Teil in der eckigen Klammer wieder eine totale Zeitableitung ist.

Entscheidend ist, dass im letzten Ausdruck  $T$  als Funktion von  $q$  und  $p$  (und nicht, wie vorher, von  $q$  und  $\dot{q}$ ) aufzufassen ist.

Mit mehreren Variablen und

$$L = L(q_1, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n, t) \quad (6.21)$$

definiert man ganz analog

$$H = H(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n, t) = \sum_{i=1}^n p_i \cdot \dot{q}_i - L, \quad (6.22)$$

wobei die  $\dot{q}_i(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n, t)$  durch auflösen der  $n$  Gleichungen

$$p_i = \frac{\partial L(q_1, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n, t)}{\partial \dot{q}_i} \quad (6.23)$$

gegeben werden.

Unsere obige Beispielrechnung verallgemeinert sich (mit  $f(q) \rightarrow f_{ij}(q_1, \dots, q_n)$ ) zu

$$L = T - V, \quad H = T + V \quad (6.24)$$

wobei  $H$  eine Funktion von  $q_i, p_i$  ist. Dies lässt sich mit dem Satz von Euler ganz allgemein zeigen, solange  $T$  eine homogene Funktion der  $\dot{q}_i$  vom Grad 2 ist.

### 6.3 Hamiltonsche Bewegungsgleichungen und Phasenraum

Aus den Eigenschaften der Legendre-Transformationen folgt

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q}. \quad (6.25)$$

Außerdem rechnen wir nach:

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial q} &= \frac{\partial}{\partial q} \{p \cdot \dot{q}(q, p, t) - L(q, \dot{q}(q, p, t), t)\} = p \cdot \frac{\partial \dot{q}}{\partial q} - \frac{\partial L}{\partial q} - \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{\partial \dot{q}}{\partial q}}_p \\ &= -\frac{\partial L}{\partial q} = -\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = -\dot{p}. \end{aligned} \quad (6.26)$$

Dies geht völlig analog mit vielen Koordinaten, so dass wir ohne große Mühe die **Hamilton-Gleichungen**

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{und} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (6.27)$$

gefunden haben.

Um die Neuigkeit dieser Beschreibung der Bewegung zu würdigen, vergleichen wir kurz die Sichtweisen der Mechanik nach Lagrange und nach Hamilton:

Nach Lagrange wird der Zustand eines Systems durch die  $\{q_i\}$ , also die Lage im **Konfigurationsraum** und durch die  $\{\dot{q}_i\}$ , die momentanen **Geschwindigkeiten**, festgelegt. Die Bewegung wird durch die Euler-Lagrange-Gleichungen, also  $n$  Differentialgleichungen 2. Ordnung beschrieben.

Nach Hamilton wird der Zustand durch  $\{\xi^a\} \equiv \{q_i, p_i\}$ , die Lage im **Phasenraum**, beschrieben. Letzterer ist  $2n$ -dimensional, so dass  $a = 1, \dots, 2n$ . Die Bewegung wird durch die Hamilton-Gleichungen, also  $2n$  Differentialgleichungen 1. Ordnung, welche man als  $\dot{\xi}^a = f^a(\xi^1, \dots, \xi^{2n})$  hinschreiben kann, definiert.

Um Intuition zu gewinnen, betrachten wir das einfache Hamiltonsche System

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q). \quad (6.28)$$

Die Hamilton-Gleichungen sind in diesem Fall

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \quad \text{und} \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -\frac{\partial V}{\partial q}. \quad (6.29)$$

Die Erste entspricht schlicht der vertrauten Definition von  $p$ , die Zweite dem Newtonschen Grundgesetz. Wir könnten natürlich die erste Gleichung ableiten,  $\ddot{q} = \dot{p}/m$  und die Zweite einsetzen:

$$\ddot{q} = -\frac{1}{m} \frac{\partial V}{\partial q}. \quad (6.30)$$

Damit wären wir wieder bei Lagrange.

Eine sehr wichtige Methode ist die der **Veranschaulichung von Lösungen im Phasenraum**. Um dies zu demonstrieren, benutzen wir die Energieerhaltung in unserem obigen einfachen Beispiel:

$$\frac{p^2}{2m} + V(q) = E = \text{const.} \quad (6.31)$$

Wie schon vom Newtonschen Zugang bekannt, können wir damit das Problem vollständig lösen. Wir lösen einfach nach  $p$  auf,

$$p = \pm \sqrt{2m(E - V(q))} \equiv p(q), \quad (6.32)$$

und haben damit die gesuchten **Trajektorien im Phasenraum** explizit gefunden. Dies in Abb. 34 für ein einfaches aber bereits hinreichend interessantes Beispielpotential (Abb. 33) illustriert.

Allgemeiner sehen wir, dass  $-\partial H/\partial q$  und  $\partial H/\partial p$  an jedem Punkt des Phasenraumes einen Vektor definieren. Dieser legt gemäß der Hamiltonschen Gleichungen die Richtung und Geschwindigkeit des Systems im Phasenraum festlegt. Damit ist die Evolution für alle Zeiten bestimmt. Das haben wir auch bereits in der Theoretische Physik I, Kapitel 2.2 und 2.3 gesehen.

Der Phasenraum eines  $n$ -dimensionalen Problems natürlich  $2n$ -dimensional und das Analogon des oben besprochenen ‘Phase Portrait’ entsprechend komplizierter.

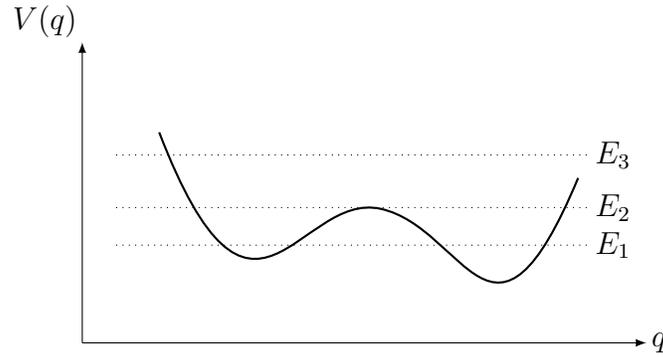


Abbildung 33: Beispielpotential.

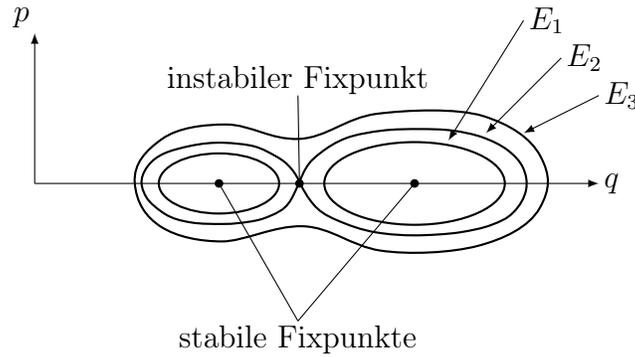


Abbildung 34: Darstellung der Trajektorien im Phasenraum.

## 7 Poisson-Klammern

### 7.1 Definition und erste Anwendungen

Sei der Phasenraum eines Hamiltonschen Systems durch  $\{q_i\}, \{p_i\}, i = 1, \dots, n$  parametrisiert. Seien weiterhin  $F(q, p, t)$  und  $G(q, p, t)$  zwei beliebige **Observablen** ( $\equiv$  Funktionen auf dem Phasenraum). Dann heißt

$$\{F, G\} \equiv \sum_i \left( \frac{\partial F}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial G}{\partial q_i} \right) \quad (7.1)$$

die **Poissonklammer** von  $F$  und  $G$ . Sie ist selbst wieder Observable.

Eine erste Anwendungen dieser Definition folgt aus der Rechnung

$$\begin{aligned} \dot{F} &= \frac{d}{dt} F = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum_i \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i \\ &= \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_i \left( \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\}. \end{aligned} \quad (7.2)$$

Wir sehen, dass die zeitliche Entwicklung einer Observablen durch ihre Poissonklammer mit  $H$  bestimmt wird.

Insbesondere sehen wir, dass  $H$  erhalten ist, wenn es nicht explizit von  $t$ -abhängt:

$$\dot{H} = \frac{\partial H}{\partial t} + \{H, H\} = \{H, H\} = 0. \quad (7.3)$$

Allgemeiner gilt: Falls  $F$  nicht explizit von  $t$  abhängt, dann gilt:

$$F \text{ erhalten} \Leftrightarrow \{F, H\} = 0. \quad (7.4)$$

Natürlich sind  $q_i, p_i$  auch (besonders einfache) Observable. Demnach gilt:

$$\begin{aligned} \dot{p}_i &= \{p_i, H\} = \sum_j \left( \frac{\partial p_i}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial p_i}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} \right) = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \\ \dot{q}_i &= \{q_i, H\} = \dots = \frac{\partial H}{\partial p_i} \end{aligned} \quad (7.5)$$

Dies sind aber wieder die Hamilton-Gleichungen.

Man bezeichnet die Variablensätze  $\{q_i\}$  und  $\{p_i\}$  auf dem Phasenraum als **zueinander kanonisch konjugiert**. Damit verbindet man oft konkret die leicht zu prüfenden Relationen

$$\{q_i, q_j\} = 0, \quad \{p_i, p_j\} = 0, \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij}. \quad (7.6)$$

Wir rechnen zum Beispiel nach:

$$\{q_i, p_j\} = \sum_k \left( \frac{\partial q_i}{\partial q_k} \frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial q_i}{\partial p_k} \frac{\partial p_j}{\partial q_k} \right) = \sum_k (\delta_{ik} \delta_{jk} - 0) = \delta_{ij}. \quad (7.7)$$

## 7.2 Die Poissonklammer als Lie-Algebra-Operation

Wir definieren: Sei  $V$  ein Vektorraum und  $[\cdot, \cdot]$  eine binäre Operation, also eine Abbildung

$$V \times V \rightarrow V, \quad (v, w) \mapsto [v, w]. \quad (7.8)$$

Man nennt das Paar  $V, [\cdot, \cdot]$  eine **Lie-Algebra**, falls:

- (1)  $[v, w] = -[w, v]$  (Antisymmetrie)
- (2)  $[\alpha v + \beta w, u] = \alpha[v, u] + \beta[w, u]$  (Linearität)
- (3)  $[u, [v, w]] + [v, [w, u]] + [w, [u, v]] = 0$  (Jacobi-Identität).

Wir haben schon erwähnt, dass kleine Drehungen eine Lie-Algebra bilden. Dies ist ein ganz spezieller Fall des folgenden allgemeineren Beispiels: Der lineare Raum der  $n \times n$ -Matrizen wird durch die Operation

$$[\cdot, \cdot] : A, B \mapsto [A, B] \equiv AB - BA \quad (7.9)$$

zur Lie-Algebra. Hier ist  $AB$  das gewöhnliche Matrix-Produkt, also  $(AB)_{ij} = A_{ik}B_{kj}$ , und  $[A, B]$  heißt der **Kommutator** von  $A$  und  $B$ . Prüfen Sie die Lie-Algebra-Eigenschaften!

Wir sind hier jedoch nicht an Vektorräumen von Matrizen sondern an Vektorräumen von Funktionen, speziell am Vektorraum der Observablen interessiert. Für uns entscheidend ist dabei der folgende **Fakt**: Die Poissonklammer macht den Raum der Observablen (also den Raum der Funktionen von  $\{q_i\}$  und  $\{p_i\}$ ) zur Lie-Algebra. Eigenschaft (1) und (2) sind offensichtlich; (3) kann mit einiger Mühe nachgerechnet werden. Wir werden dies nicht tun, da sich diese Eigenschaft später (mit mächtigen mathematischen Konzepten) leicht zeigen lässt.

### 7.3 Poissonklammern und Vektorfelder

$H$  definiert auf dem Phasenraum eine ‘Bewegung’ und damit (zunächst rein intuitiv) ein **Vektorfeld**, vgl. Abb. 35. Konkret sind die beiden Komponenten des Vektors an einem beliebigen Punkt durch

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (7.10)$$

gegeben.

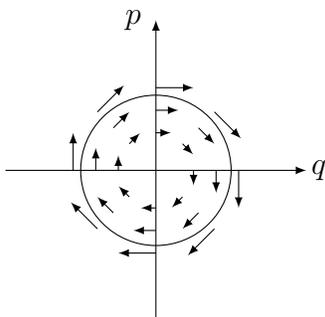


Abbildung 35: Vektorfeld, welches die Bewegung eines harmonischen Oszillators im Phasenraum beschreibt sowie eine der Trajektorien.

Man kann diese Bewegung so auffassen, dass sich jede Funktion  $F = F(q, p)$  (Observable) mit der Zeit ändert. Wir schließen explizite Zeitabhängigkeit aus und haben (mit  $\xi^a = \{q, p\}$ )

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial \xi^a} \cdot \frac{d\xi^a}{dt} = \frac{d\xi^a}{dt} \cdot \frac{\partial F}{\partial \xi^a} \equiv V^a(\xi) \cdot \frac{\partial F}{\partial \xi^a}. \quad (7.11)$$

Hier sind  $V^a$  die Komponenten des Vektorfeldes an jedem Punkt  $\xi \in \mathbb{R}^2$ . Wir sehen weiterhin, dass wir mit einer solchen Bewegung und dem entsprechenden Vektorfeld immer auf natürliche Weise einen Differentialoperator (1. Ordnung) assoziieren können:

$$\frac{dF}{dt} = \left( V^a(\xi) \cdot \frac{\partial}{\partial \xi^a} \right) F \equiv DF. \quad (7.12)$$

Das Obige gilt allgemein für Bewegungen auf einem mehrdimensionalen Raum und entsprechende Vektorfelder. Im Fall von  $n$  Freiheitsgraden gilt z.B. nicht mehr  $a = 1, 2$  sondern  $a = 1, \dots, 2n$

Wenn die Zeitentwicklung oder Bewegung konkret durch die Hamilton-Gleichungen bestimmt ist, haben wir

$$\frac{dF}{dt} = -\{H, F\} = -\left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q_i}\right) F \equiv -D_H F. \quad (7.13)$$

Das negative Vorzeichen ist hier bequeme Konvention. Wir haben gelernt:  $H$  induziert eine Bewegung auf dem Phasenraum und damit ein Vektorfeld und damit wiederum einen Differentialoperator  $D_H$ .

$H$  ist aber nur *eine* der vielen Observablen und wir können prinzipiell auch *jede andere* Observable nehmen und mit ihr ein Vektorfeld, einen Differentialoperator und eine Bewegung assoziieren:

$H$  induziert

$$\frac{dF}{dt} = -D_H F = \{F, H\};$$

$G = G(q, p)$  induziert

$$\frac{dF}{dt} = -D_G F = \{F, G\}.$$

Wir sollten im zweiten Fall nicht an eine Bewegung in der Zeit sondern an eine Transformation auf dem Phasenraum denken. Deshalb ist es irreführend, die unabhängige Variable  $t$  zu nennen. Mit dem neutralen Parameter  $u$  haben wir:

$G = G(q, p)$  induziert

$$\frac{dF}{du} = -D_G F = \{F, G\}.$$

Die Lösung dazu ist eine Funktion  $F(q, p, u)$ , so dass  $F(q, p, 0) \equiv F(q, p)$ . Mit wachsendem  $u$  ergibt sich eine immer größere ‘Bewegung’, analog dazu, was  $H$  im Zusammenhang mit fortschreitendem  $t$  verursacht.

Eine entscheidende Beobachtung (ohne Beweis) ist nun, dass die obige Vorschrift einen **Isomorphismus von Lie-Algebren** induziert:

$$\text{Observable} \quad \rightarrow \quad \text{Differentialoperatoren} \quad (7.14)$$

$$\{\cdot, \cdot\} \quad \rightarrow \quad [D_F, D_G] = \underbrace{D_F D_G - D_G D_F}_{\text{Kommutator}}. \quad (7.15)$$

Links steht die Lie-Algebra der Funktionen mit der Poisson-Klammer, rechts die Differentialoperatoren = Vektorfelder = Bewegungen mit dem Kommutator als Lie-Algebra-Operation. Man beachte, dass  $D_F D_G - D_G D_F$  einerseits (im Gegensatz zu partiellen Ableitungen) nicht

Null ist, weil z.B. das links stehende  $D_F$  auf die Koeffizienten der partiellen Ableitungen im rechts stehenden  $D_G$  wirkt. Andererseits kürzen sich alle Terme, in denen beiden Ableitungen auf ‘nach rechts’ wirken, so dass wieder ein Differentialoperator 1. Ordnung entsteht.

Man beachte, dass das Bild der Zuordnung in (7.14) nur ein Unterraum des Raumes *aller* Differentialoperatoren oder Vektorfelder ist: Nicht jedes Vektorfeld ist von der Form  $(-\partial F/\partial p_i, \partial F/\partial q_i)^T$  mit einer Funktion  $F(q, p)$ . Aber *auf* diesem Unterraum erhält man nur Null, wenn das Urbild Null war (wie es bei einem Isomorphismus sein muss). Observable, die sich nur um eine Konstante unterscheiden, werden als äquivalent angesehen:  $F \sim F + \text{const.}$

Um den Umgang mit Differentialoperatoren zu üben, rechnen wir ein (unphysikalisches) sehr einfaches Beispiel mit nur einer Variablen: Für

$$D_1 \equiv \frac{\partial}{\partial x}, \quad D_2 \equiv x \cdot \frac{\partial}{\partial x}, \quad (7.16)$$

gilt

$$D_1 D_2 f = D_1(x f') = f' + x \cdot f'' \quad \text{und} \quad D_2 D_1 f = D_2(f') = x \cdot f''. \quad (7.17)$$

Damit finden wir

$$(D_1 D_2 - D_2 D_1) f = f' + x f'' - x f'' = f', \quad (7.18)$$

und somit

$$D_1 D_2 - D_2 D_1 = D_1. \quad (7.19)$$

**Erhaltungsgrößen** sind solche Observablen, welche unter der durch  $H$  induzierten Bewegung invariant sind, das heißt  $D_H F = 0$ . Anders gesagt, ihre **Poisson-Klammer mit  $H$  verschwindet**. Die zugehörige Symmetrie ist die durch  $D_F$  induzierte Bewegung (Umkehrung des Noether-Theorems).

Wir belegen dies mit einem sehr einfachen Beispiel im zweidimensionalen Phasenraum. Wir wissen, dass Translationsinvarianz in  $q \equiv x$  zur Erhaltung von  $p$  führt. Also sollte  $F(q, p) \equiv p$  Translationen generieren. Wir müssen also

$$\frac{dG(q, p, u)}{du} = -D_p G = \{G, p\} = \frac{\partial G}{\partial q}. \quad (7.20)$$

lösen. Mit der Anfangsbedingung  $G(q, p, 0) = G(q, p)$  sieht man sofort, dass  $G(q, p, u) = G(q + u, p)$  eine Lösung ist. Wir finden also die erwartete Translation in  $q$  als ‘Bewegung’ auf dem Phasenraum, die von  $p$  generiert wird.

## 7.4 Die Drehimpuls-Lie-Algebra in der Hamilton-Mechanik

Aus Kapitel 6 der Theoretische Physik I wissen wir über kleine Drehungen:

$$R(\bar{\varepsilon}) = \mathbb{1} + \varepsilon^i T^i \quad \text{mit} \quad (T^i)^{jk} = \varepsilon^{ijk}. \quad (7.21)$$

Wir hatten (in einem Fortgeschrittenen Kommentar) auch erwähnt, dass die  $T^i$  eine Basis von  $\mathfrak{so}(3) = \text{Lie}(SO(3))$  bilden.

Man rechnet in der Tat leicht nach, dass der Kommutator den von den  $T^i$  aufgespannten Raum zur Lie-Algebra macht:

$$[T^i, T^j] = \varepsilon^{ijk} T^k. \quad (7.22)$$

Das Noether-Theorem ordnet den durch die  $T^i$  generierten Symmetrien Erhaltungsgrößen zu, und zwar die Drehimpulskomponenten

$$L^i = \varepsilon^{ijk} x^j p^k. \quad (7.23)$$

Wir haben hier, wie im  $\mathbb{R}^3$  üblich, die verallgemeinerten Koordinaten schlicht als  $q_i \equiv x^i$  bezeichnet.

Man prüft nun mit der Definition der Poisson-Klammer leicht nach, dass

$$\{L^i, L^j\} = \varepsilon^{ijk} L^k. \quad (7.24)$$

Die  $L^i$  generieren auf dem Phasenraum genau die Bewegung, welche die  $T^i$  auf dem Konfigurationsraum generieren. Ganz explizit heißt dies z.B. für die Koordinaten  $x^i$ :

$$\{L^i, x^j\} = \varepsilon^{ijk} x^k, \quad (T^i \cdot x)^j = (T^i)^{jk} x^k = \varepsilon^{ijk} x^k. \quad (7.25)$$

## 7.5 Satz von Liouville

Wir wollen weiterhin die einheitliche Bezeichnung  $\xi$  für Phasenraum-Koordinaten nutzen, wenn sinnvoll sogar mit Vektor-Notation:

$$\{q_i\}, \{p_i\} \rightarrow \bar{\xi}. \quad (7.26)$$

Somit beschreibe also  $\bar{\xi}(t) = \{q_1(t), \dots, q_n(t), p_1(t), \dots, p_n(t)\}$  die Trajektorie eines physikalischen Systems im Phasenraum. Die entsprechenden Phasenraum-Geschwindigkeiten wollen wir mit  $\bar{\omega}$  bezeichnen, also

$$\bar{\omega}(t) \equiv \frac{d\bar{\xi}(t)}{dt} = \left\{ \frac{\partial H}{\partial p_1}, \dots, \frac{\partial H}{\partial p_n}, -\frac{\partial H}{\partial q_1}, \dots, -\frac{\partial H}{\partial q_n} \right\}. \quad (7.27)$$

Falls  $H$  nicht explizit zeitabhängig ist, gibt es ein fest vorgegebenes Vektorfeld

$$\bar{\omega}(q, p) = \left\{ \frac{\partial H(q, p)}{\partial p_1}, \dots, \frac{\partial H(q, p)}{\partial p_n}, -\frac{\partial H(q, p)}{\partial q_1}, \dots, -\frac{\partial H(q, p)}{\partial q_n} \right\} \quad (7.28)$$

im Phasenraum, welches für alle Trajektorien gleichzeitig gilt, vgl. Abb. 36. Wir wollen im folgenden weniger an die einzelne Lösung (7.27) und mehr an das Vektorfeld (7.28) als Ganzes denken.

Unter Benutzung der Hamiltonschen Gleichungen rechnen wir nun nach:

$$\text{div } \bar{\omega} = \bar{\nabla}_{\bar{\xi}} \bar{\omega} = \bar{\nabla}_{q,p} \bar{\omega} = \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial \omega^i}{\partial q_i} + \frac{\partial \omega^{n+i}}{\partial p_i} \right) = \sum_i \left( \frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i} \right) = 0. \quad (7.29)$$

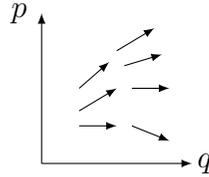


Abbildung 36: Geschwindigkeitsfeld  $\bar{\omega}(q, p)$ .

Wenn für ein Geschwindigkeitsfeld  $\text{div } \bar{\omega} = 0$  gilt, dann sagt man, dass  $\bar{\omega}(\xi)$  eine **inkompressible Strömung** beschreibt. In der Tat, wegen Gauß gilt für die Oberfläche jedes Teilvolumens im von uns beschriebenen Gebiet

$$\int_O \bar{\omega} \cdot d\bar{f} = 0. \quad (7.30)$$

Es strömt also pro Zeiteinheit in jedes Teilvolumen genau so viel hinein wie heraus.

Damit ist auch zumindest intuitiv klar, dass der **Satz von Liouville** gilt: **Die Größe von Teilvolumina des Phasenraums ändert sich durch die von der Hamiltonschen Dynamik definierte Strömung nicht.** (Die Form kann sich natürlich ändern, vgl. Abb. 37).

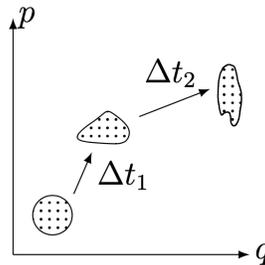


Abbildung 37: Phasenraum mit Teilvolumina unveränderlicher Größe.

Zur genaueren Begründung betrachten wir die infinitesimale Bewegung aller Punkte eines Startvolumen  $V$ , vgl. Abb. 38. Das dadurch definierte neue Volumen sei  $V'$  und für die Differenz gilt

$$\Delta V = V' - V = \int_O d\bar{f} \cdot \Delta\bar{\xi} = \int_O d\bar{f} \cdot \bar{\omega} \Delta t. \quad (7.31)$$

Terme höherer Ordnung in  $\Delta\xi$  bzw.  $\Delta t$  sind hier vernachlässigt. Die Begründung der obigen Formel sollte aus Abbildung 38 anschaulich klar sein. (Das Vorzeichen des Produktes  $d\bar{f} \cdot \Delta\bar{\xi}$  entscheidet darüber, an welchen Stellen der Oberfläche  $O$  das Volumen  $V$  wächst bzw. sich zurückzieht.) Nach Teilen durch  $\Delta t$  und Grenzwertbildung folgt

$$\frac{dV}{dt} = \int_O d\bar{f} \cdot \bar{\omega} = \int_V d^{2n}\xi (\nabla \bar{\omega}) = \int_V d^{2n}\xi (\text{div}(\bar{\omega})) = 0, \quad (7.32)$$

wie behauptet. Im Phasenraum strömen die Teil-Volumina also wie die einer inkompressiblen Flüssigkeit.

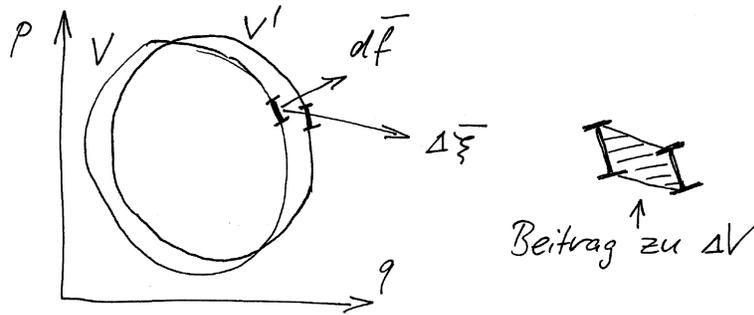


Abbildung 38: Startvolumen  $V$  mit infinitesimaler Bewegung aller Punkte.

## 8 Hamilton-Mechanik in Differentialformen

### 8.1 Tangential- und Cotangentialraum (M)

Sei  $M$  ein  $d$ -dimensionaler Raum: Eine Menge von Punkten, die sich zumindest stückweise durch  $d$  reelle Koordinaten parametrisieren lässt.<sup>11</sup> Für  $d = 2$  ist dies z.B. eine Fläche, etwa eine Sphäre. Solch ein Raum 'hat Realität' unabhängig von Koordinaten. Ein anderes, noch einfacheres Beispiel ist die Ebene (Abb. 39) mit Koordinaten

$$x^1, x^2 \quad \text{oder, alternativ,} \quad r, \varphi. \quad (8.1)$$

Der **Koordinatenwechsel** wird durch die wohlbekanntenen Ausdrücke für

$$x^1 = x^1(r, \varphi) \quad \text{und} \quad x^2 = x^2(r, \varphi) \quad (8.2)$$

beschrieben.

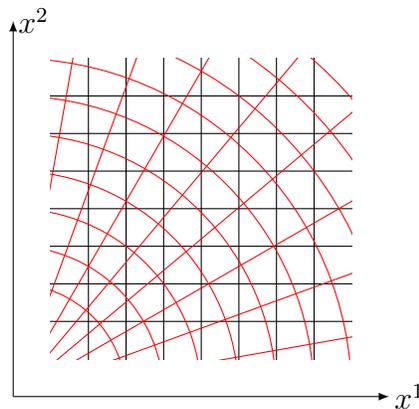


Abbildung 39: Verschiedene Koordinaten auf einem Raum bzw. Parametrisierungen eines Raumes.

<sup>11</sup> Es handelt sich explizit **nicht** um einen Vektorraum. Das hier eigentlich relevante Konzept ist das einer **Mannigfaltigkeit**, aber wir unterdrücken hier die nicht ganz einfache Definition dieses Begriffs.

Ebenso sind Vektorfelder auf diesem Raum ‘real’ unabhängig von den Koordinaten. Wir sehen das z.B. indem wir uns erinnern, dass wir Vektorfelder mit Differentialoperatoren erster Ordnung assoziiert hatten:

$$D : f \mapsto Df. \quad (8.3)$$

Dies ist eine Abbildung auf dem Raum der Funktionen auf  $M$  (also koordinatenunabhängig).

In gewissen Koordinaten  $x^i$  sei

$$D = v^i(x) \cdot \frac{\partial}{\partial x^i}. \quad (8.4)$$

In **anderen** Koordinaten (dies könnten zum Beispiel  $(r, \varphi)$  sein) gilt analog

$$D = v'^i(x') \frac{\partial}{\partial x'^i}. \quad (8.5)$$

Die Umrechnung erfolgt, in dem man mit der Kettenregel schreibt

$$v^i \frac{\partial}{\partial x^i} = v^i \left( \frac{\partial x'^j}{\partial x^i} \right) \frac{\partial}{\partial x'^j} \quad (8.6)$$

und dann durch **Koeffizientenvergleich** folgert, dass

$$v'^i = \left( \frac{\partial x'^i}{\partial x^j} \right) v^j. \quad (8.7)$$

Die so erklärten Vektoren an einem gewissen Punkt  $q \in M$  bilden den **Tangentialraum**  $T_q M$ . Der Tangentialraum  $T_q M$  an einem Punkt  $q$  unseres Raumes (z.B. einer Sphäre) ist ein **Vektorraum, welcher  $M$  bei  $q$  lokal approximiert**, vgl. Abb. 40.

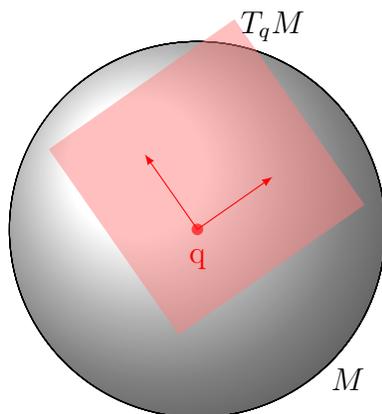


Abbildung 40: Darstellung des Tangentialraums.

Eine Basis (immer an einem gewissen Punkt  $q$  unseres Raumes) bilden die Differentialoperatoren

$$\partial_i \equiv \frac{\partial}{\partial x^i}, \quad (8.8)$$

also die partielle Ableitung nach der  $i$ -ten Koordinate einer beliebigen Koordinatendarstellung. Anschaulich gesprochen sind die entsprechenden Basisvektoren schlicht Pfeile in die Richtung der jeweiligen Koordinate. Eine andere Koordinatendarstellung liefert nur eine andere Basis für den selben Tangentialraum.

Wir erinnern uns, dass es zu jedem Vektorraum  $\mathbb{V}$  einen Dualraum  $\mathbb{V}^*$  gibt: den Raum der linearen Funktionale auf  $\mathbb{V}$ . In unserem Fall heißt dieser der **Cotangentialraum**  $T_q^*$ . Gegeben unsere obige Basis auf  $T_q$ , definieren wir auf  $T_q^*$  die sogenannte **duale Basis**  $dx^i$  durch

$$dx^i \left( \frac{\partial}{\partial x^j} \right) = \delta_j^i. \quad (8.9)$$

Aufgrund der Linearität lautet damit die Anwendung eines allgemeinen Covektors  $\omega = \omega_i dx^i \in T_q^*$  auf einen allgemeinen Vektor  $v = v^j \partial_j \in T_q$

$$\omega(v) = \omega_i dx^i \left( v^j \frac{\partial}{\partial x^j} \right) = \omega_i v^j \delta_j^i = \omega_i v^i. \quad (8.10)$$

## 8.2 Vektorfelder und 1-Formen (M)

All das bisher gesagte gilt nun auch **für alle Punkte  $q$  unseres Raumes gleichzeitig**. So können wir z.B. von Vektoren zu Vektorfeldern übergehen. Ein **Vektorfeld** ist demnach eine Abbildung, die jedem Punkt  $q \in M$  einen Vektor  $v(q) \in T_q M$  zuordnet:

$$q \mapsto v(q) \in T_q M. \quad (8.11)$$

In Koordinaten ist dies ein Satz von  $d$  Funktionen  $v^i(x)$ .

Ganz analog ordnet eine **1-Form** jedem Punkt  $q \in M$  ein Element  $\omega(q) \in (T_q M)^*$  zu. Jedes  $\omega(q)$  ist also eine lineare Abbildung  $\omega(p) : T_q M \rightarrow \mathbb{R}$ . Man schreibt auch

$$q \mapsto \omega(q) \in T_q^* M \equiv (T_q M)^*. \quad (8.12)$$

Ebenso wie ein Vektorfeld ist eine 1-Form in Koordinaten schlicht ein Satz von  $d$  Funktionen:  $\omega(x) = \omega_i(x) dx^i$ .

Ein sehr wichtiges Beispiel ist das folgende: Zu jeder Funktion  $f$  gehört natürlicherweise eine 1-Form  $\omega = df$ , welche definiert ist durch

$$df(v) = v^i \frac{\partial}{\partial x^i}(f) = v^i \frac{\partial f}{\partial x^i} \quad (\equiv D_v f). \quad (8.13)$$

Man rechnet mit unserer Definition der dualen Basis sofort nach, dass

$$df = \left( \frac{\partial f}{\partial x^i} \right) \cdot dx^i \quad \text{bzw.} \quad (df)_i = \frac{\partial f}{\partial x^i}. \quad (8.14)$$

### 8.3 Höhere p-Formen (M)

Nun betrachten wir einen neuen Vektorraum – das Tensorprodukt von  $T_q^*$  mit sich selbst:

$$T_q^* \otimes T_q^* \quad \text{mit der Basis} \quad \{dx^i \otimes dx^j\} \equiv \{dx^1 \otimes dx^1, dx^1 \otimes dx^2, \dots\}. \quad (8.15)$$

Man kann ihn als Raum der bilinearen Funktionale auf  $T_q$  auffassen, es gilt also z.B.

$$(dx^i \otimes dx^j) \left( \frac{\partial}{\partial x^k}, \frac{\partial}{\partial x^l} \right) = dx^i \left( \frac{\partial}{\partial x^k} \right) \cdot dx^j \left( \frac{\partial}{\partial x^l} \right) = \delta_k^i \delta_l^j. \quad (8.16)$$

Einen ‘Vektor’ aus diesem Raum können wir demnach als

$$\omega^2(q) = \omega_{ij} dx^i \otimes dx^j \quad (8.17)$$

schreiben, wobei der obere Index ‘2’ uns daran erinnert, dass wir uns im Raum  $T_q^* \otimes T_q^* \equiv (T_q^*)^{\otimes 2}$  befinden. Wenn wir nun statt des zweifachen das  $p$ -fache Tensor-Produkt des Cotangentialraumes mit sich selbst betrachten, kommen wir zu einem Tensor vom Rang  $p$ . Wir schreiben also

$$\omega^p(q) \in (T_q^*)^{\otimes p}. \quad (8.18)$$

Wie wir später sehen werden, spielen unter solchen Tensoren die **total antisymmetrischen** eine besondere Rolle. Diese sind dadurch definiert, dass  $\omega_{ij\dots kl}$  sein Vorzeichen wechselt, wenn man zwei beliebige benachbarte Indizes vertauscht. Man schreibt

$$\omega^p(q) \in (T_q^*)^{\wedge p} \subset (T_q^*)^{\otimes p} \quad (8.19)$$

und nennt  $(T_q^*)^{\wedge p}$  den antisymmetrischen Unterraum von  $(T_q^*)^{\otimes p}$ . Wiederum geht das alles auch an allen Punkten von  $M$  gleichzeitig – wir haben dann ein (kovariantes - also mit unterem Index) antisymmetrisches Tensorfeld. Dies ist eine sogenannte **p-Form** – ein in Mathematik und theoretischer Physik äußerst wichtiger Begriff.

Um nicht zu viel schreiben zu müssen, machen wir nur den Fall mit Rang 2 ( $p = 2$ ) explizit:

$$\omega^2(x) = \omega_{ij}(x) dx^i \otimes dx^j \quad \text{mit} \quad \omega_{ij} = -\omega_{ji}. \quad (8.20)$$

Die Basiselemente von  $(T_q^*)^{\wedge p}$  bezeichnet man in Analogie zu denen von  $(T_q^*)^{\otimes p}$ , mit einem ‘Wedge’. Also hat man z.B.

$$\omega^2(x) = \frac{1}{2} \omega_{ij}(x) dx^i \wedge dx^j \equiv \omega_{ij}(x) \frac{1}{2} (dx^i \otimes dx^j - dx^j \otimes dx^i). \quad (8.21)$$

Um es ganz konkret zu machen, schreiben wir noch eine besondere Form im Fall  $p = d = 2$  hin:

$$\omega^2 = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij} dx^i \wedge dx^j = \varepsilon_{ij} \frac{1}{2} (dx^i \otimes dx^j - dx^j \otimes dx^i) = dx^1 \otimes dx^2 - dx^2 \otimes dx^1. \quad (8.22)$$

Eine solche spezielle  $p$ -Form in  $p$  Dimensionen (eine ‘**Top-Form**’) gibt es für jedes  $p$ . Aber ein noch höheres  $p$ , so wie z.B.  $p = 2$  in  $d = 1$  geht nicht:  $dx^1 \wedge dx^1 = 0$ .

Hingegen ist  $p < d$  ohne Weiteres erlaubt. So ist die allgemeine 2-Form in  $d \geq 2$  Dimensionen,

$$\omega^2 = \frac{1}{2} \omega_{ij} dx^i \wedge dx^j, \quad (8.23)$$

schlicht durch eine ortsabhängige, antisymmetrische  $d \times d$  Matrix  $\omega_{ij}(x)$  gegeben. Die Anwendung auf zwei Vektoren  $u = u^i \partial_i$  und  $v = v^i \partial_i$  ist mit unseren Definitionen leicht zu berechnen,

$$\omega^2(u, v) = \omega_{ij} u^i v^j, \quad (8.24)$$

wobei man beim Nachrechnen natürlich die Antisymmetrie von  $\omega_{ij}$  benutzen muss.

Ohne darauf in angemessenem Detail eingehen zu können, definieren wir noch den in diesem Zusammenhang zentralen Begriff der **äußere Ableitung** ‘ $d$ ’:

$$d: \omega^p \mapsto \omega^{p+1} \quad (8.25)$$

$$d(\omega_{i_1 \dots i_p} dx^{i_1} \wedge \dots \wedge dx^{i_p}) \equiv \left( \frac{\partial}{\partial x^j} \omega_{i_1 \dots i_p} \right) dx^j \wedge dx^{i_1} \wedge \dots \wedge dx^{i_p}. \quad (8.26)$$

Ein Beispiel, dass die obigen Notation ‘ $df$ ’ erklärt, ist

$$d(f) \equiv df \equiv \left( \frac{\partial f}{\partial x^i} \right) dx^i, \quad (8.27)$$

wobei  $f$  eine Funktion und somit eine 0-Form ist. Ein wichtiger allgemeiner Fakt ist  $d^2 = 0$ .

## 8.4 Formulierung der Hamilton-Mechanik in Formen

Ein **Phasenraum** ist ein  $2n$ -dimensionaler Raum (Mannigfaltigkeit mit  $d = 2n$ ) mit einer nicht-degenerierten, geschlossenen 2-Form

$$\omega^2 = \omega = \frac{1}{2} \omega_{ij}(\xi) d\xi^i \wedge d\xi^j, \quad (8.28)$$

welche man auch eine **symplektische Struktur** nennt. Nicht-degeneriert bedeutet, dass die Matrix  $\omega_{ij}$  an jedem Punkt  $\xi$  invertierbar ist, und **geschlossen** bedeutet

$$d\omega = 0. \quad (8.29)$$

Eine **Hamilton-Funktion**  $H = H(\xi) = H(\xi^1, \dots, \xi^{2n})$  ist eine Funktion auf dem Phasenraum.

Die Dynamik wird durch die Hamilton-Gleichungen definiert:

$$\omega(\dot{\xi}) = dH. \quad (8.30)$$

Diese letzte Aussage bedarf der Erklärung:  $dH$  ist eine 1-Form;  $\omega$  eine 2-Form. Eine 2-Form braucht zwei Vektoren, um eine Zahl zu produzieren. Nun ist aber  $\dot{\xi}$  nur ein Vektor, genauer ein Vektorfeld:

$$\dot{\xi} = \{\dot{\xi}^1, \dots, \dot{\xi}^{2n}\} \quad \text{bzw.} \quad \dot{\xi} = \dot{\xi}^i \frac{\partial}{\partial \xi^i}. \quad (8.31)$$

Es beschreibt intuitiv die Bewegung auf dem Phasenraum in der Zeit:  $\Delta \xi^i \simeq \dot{\xi}^i \Delta t$ . Wenn wir nun in obiger Formel  $\omega$  nur *ein* solches Vektor-Argument geben, dann meinen wir damit eigentlich

$$\omega(\dot{\xi}) \equiv \omega(\cdot, \dot{\xi}). \quad (8.32)$$

Es ist also noch ein Argument ‘offen’, so dass wir es mit einer 1-Form zu tun haben. Damit kann die Aussage  $\omega(\dot{\xi}) = dH$  als 1-Formen-Gleichung gelesen werden.

Jetzt wählen wir auf  $M$  Koordinaten  $q^\alpha, p_\alpha$ , sodass

$$\omega = dp_\alpha \wedge dq^\alpha \quad (\alpha = 1, \dots, n). \quad (8.33)$$

Dass dies (lokal) stets möglich ist, ist ein nichttrivialer Fakt. Mit  $\xi^i = \{q^1, \dots, q^n, p_1, \dots, p_n\}$  können wir in diesen Koordinaten schreiben

$$\omega_{ij} = \left( \begin{array}{c|c} 0 & -\mathbb{1} \\ \hline \mathbb{1} & 0 \end{array} \right)_{ij}. \quad (8.34)$$

Es sei angemerkt, dass die Forderung

$$S\omega S^T = \omega \quad (\text{analog zu } R\mathbb{1}R^T = \mathbb{1}) \quad (8.35)$$

die symplektischen Matrizen  $S$  und die Gruppen  $Sp(2n) \ni S$  (analog zu  $SO(n) \ni R$ ) definiert.

In den so speziell gewählten Koordinaten können wir nun die oben eingeführten Hamilton-Gleichungen auswerten. Die linke Seite von (8.30) lautet explizit

$$dp_\beta \wedge dq^\beta \left( \cdot, \dot{q}^\alpha \frac{\partial}{\partial q^\alpha} + \dot{p}_\alpha \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \right) = \dot{q}^\alpha dp_\alpha - \dot{p}_\alpha dq^\alpha. \quad (8.36)$$

Die rechte Seite lautet explizit

$$dH = \frac{\partial H}{\partial q^\alpha} dq^\alpha + \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} dp_\alpha. \quad (8.37)$$

Die gewohnten Hamiltongleichungen folgen durch Koeffizientenvergleich:

$$\dot{q}^\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}, \quad \dot{p}_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q^\alpha}. \quad (8.38)$$

### Fortgeschrittener Zusatzstoff:

Man prüft schließlich noch leicht nach, dass die Poissonklammer mittels  $\omega$  eine sehr natürliche Formulierung findet. Dazu überlegen wir uns zunächst, dass wir mit Hilfe der inversen Matrix  $\omega^{ij}$ ,

$$\omega^{ij} \omega_{jk} \equiv \delta_k^i, \quad (8.39)$$

statt von der 2-Form  $\omega$  auch von einer antisymmetrischen Bilinearform  $\underline{\omega}$  auf dem Cotangentialraum reden können. Damit definieren wir

$$\{F, G\} \equiv \underline{\omega}(dF, dG). \quad (8.40)$$

In der Tat, wenn wir Koordinaten wählen, sodass  $\omega_{ij}$  (und damit auch  $\omega^{ij}$ ) die oben gegebene kanonische Form annimmt, so finden wir mit

$$dF = (dF)_i d\xi^i = \frac{\partial F}{\partial \xi^i} d\xi^i \quad \text{etc.}, \quad (8.41)$$

dass

$$\underline{\omega}(dF, dG) = \omega^{ij} (dF)_i (dG)_j = \delta_\alpha^\beta \left( \frac{\partial F}{\partial q^\beta} \frac{\partial G}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial F}{\partial p_\alpha} \frac{\partial G}{\partial q^\beta} \right). \quad (8.42)$$

Dies ist aber genau unsere alte Definition der Poisson-Klammer.

Außerdem bemerken wir noch, dass die oben angegebene abstrakte Hamilton-Gleichung in Koordinaten die Form

$$\omega_{ij} \dot{\xi}^j = \frac{\partial H}{\partial \xi^i} \quad (8.43)$$

annimmt. Dies ist äquivalent zu

$$\dot{\xi}^i = \omega^{ij} \frac{\partial H}{\partial \xi^j}. \quad (8.44)$$

Diese Gleichung ordnet jeder Funktion (nicht unbedingt  $H$ ) ein Vektorfeld zu, das natürlich schlicht die entsprechende induzierte Bewegung auf dem Phasenraum beschreibt. Wenn wir dieses Vektorfeld  $V(H)$  nennen, sehen wir leicht, dass wir die obige Definition der Poisson-Klammer mittels  $\omega$  auch als

$$\{F, G\} = \omega(V(F), V(G)) \quad (8.45)$$

schreiben können. Hier haben wir  $\omega$  als Argumente die Vektorfelder der durch  $F$  und  $G$  induzierten Bewegungen gegeben und erhalten als Resultat die entsprechende Poisson-Klammer. Wir wollen zum Abschluss (8.45) explizit nachrechnen:

$$\omega(V(F), V(G)) = \omega_{ij} V(F)^i V(G)^j = \omega_{ij} \left( \omega^{ik} \frac{\partial F}{\partial \xi^k} \right) \left( \omega^{jl} \frac{\partial G}{\partial \xi^l} \right) = \omega^{kl} \frac{\partial F}{\partial \xi^k} \frac{\partial G}{\partial \xi^l}. \quad (8.46)$$

Dies entspricht gerade dem mittleren Ausdruck von (8.42). Eine ausgezeichnete Quelle zur Vertiefung ist [2].

## 8.5 Integration von Differentialformen (M)

Wir behaupten, dass es wohldefiniert (und mathematisch ausgesprochen natürlich) ist, eine  $p$ -Form über eine  $p$ -dimensionale Hyperfläche  $C_p$  in  $d$  Raumdimensionen ( $d \geq p$ ) zu integrieren:

$$\int_{C_p} \omega^p = \text{Zahl}. \quad (8.47)$$

Der Fall  $p = 2$  und  $d = 3$  ist in Abb. 41 illustriert.

Die intuitive Erklärung ist einfach: Man zerlege die Hyperfläche in kleine Parallelepipede (Abb. 42). Man definiere dazu die Vektoren  $v_i$  als Basisvektoren zu einer beliebigen Parametrisierung der Hyperfläche, jeweils multipliziert mit einer sehr kleinen Zahl. Dann definiert

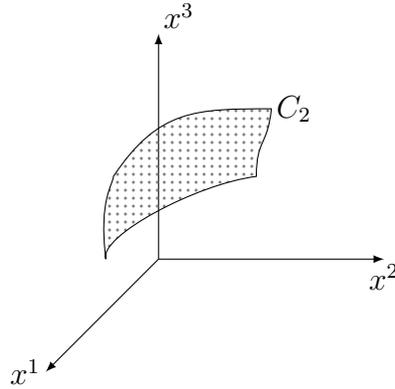


Abbildung 41: Zweidimensionale Hyperfläche im  $\mathbb{R}^3$ .

man

$$\int_{C_p} \omega^p = \lim \sum_{\text{Parallelepipede}} \omega^p(v_1, \dots, v_p)$$

Man kann sich leicht überlegen, dass sich für  $p = d$  und  $\omega = \varepsilon$  gerade das Volumen jedes Parallelepipeds und somit insgesamt das Volumen- bzw. Flächenintegral ergibt.<sup>12</sup>

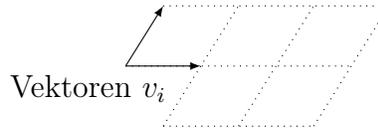


Abbildung 42: Hyperfläche aus Parallelepipeden.

Entscheidend ist die manifeste Koordinatenunabhängigkeit dieser Definition des  $p$ -Form-Integrals.

Dennoch wird das Integral in der Praxis natürlich meist in Koordinaten ausgeführt. Dazu betrachten wir zunächst das einfache Beispiel  $d = p = 2$  mit

$$v_1 = \Delta x^1 \frac{\partial}{\partial x^1} \quad \text{und} \quad v_2 = \Delta x^2 \frac{\partial}{\partial x^2}. \quad (8.48)$$

Wir finden

$$\int \omega = \lim \sum \omega(v_1, v_2) = \lim \sum \omega_{12} \Delta x^1 \Delta x^2 = \int \omega_{12} dx^1 dx^2, \quad (8.49)$$

wobei der Faktor  $1/p! = 1/2!$  aus der Definition von  $\omega$  beim Summieren über die Indizes von  $\omega_{ij}$  wegfällt. Die Summenzeichen in (8.49) beziehen sich auf die davon unabhängige

<sup>12</sup> Wir nehmen hier an, dass  $v_1 \cdots v_n$  die gleiche Orientierung hat, wie die Basis unseres Koordinatensystems, welches somit die Orientierung unserer Hyperfläche definiert. Man müsste hierzu eigentlich viel mehr sagen, was wir aus Zeitgründen nicht tun.

Summation über alle Parallelepipede und der Grenzwert steht für  $\Delta x^i \rightarrow 0$ . Im letzten Ausdruck erkennen wir das gewöhnliche, Riemannsche Flächenintegral.

In anderen Koordinaten findet man entsprechend

$$\int \omega = \int \omega'_{12} dx'^1 dx'^2. \quad (8.50)$$

Dies gilt analog für  $d = p > 2$ .

Die Transformation der Komponenten von Formen geschieht (mit völlig analoger Herleitung) so wie bei Vektoren:

$$\omega'_{i_1, \dots, i_p}(x') = \left( \frac{\partial x^{j_1}}{\partial x'^{i_1}} \right) \dots \left( \frac{\partial x^{j_p}}{\partial x'^{i_p}} \right) \omega_{j_1, \dots, j_p}(x). \quad (8.51)$$

Man muss aber beachten, dass  $x$  und  $x'$  vertauscht stehen, was mit der unteren (statt, bei Vektoren, oberen) Indexposition einhergeht.

Für eine  $p$ -Form in  $p$  Dimensionen gilt wegen der totalen Antisymmetrie außerdem stets

$$\omega = \varepsilon f(x), \quad (8.52)$$

mit  $f(x)$  einer beliebigen Funktion. Wenn wir dies entsprechend auf beiden Seiten von (8.51) einsetzen, ergibt sich (für  $p = d$ )

$$\varepsilon_{i_1, \dots, i_p} f'(x') = \det \left( \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \right) \varepsilon_{i_1, \dots, i_p} f(x) \quad \text{bzw.} \quad f'(x') = \det \left( \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \right) f(x). \quad (8.53)$$

Damit können wir die Koordinatenunabhängigkeit des Formenintegrals explizit nachprüfen. Wir betrachten zunächst

$$\int \omega = \int dx^1 \dots dx^p \omega_{1\dots p} = \int dx^1 \dots dx^p f(x^1, \dots, x^p). \quad (8.54)$$

In den gestrichenen Koordinaten haben wir analog

$$\begin{aligned} \int dx'^1 \dots dx'^p \omega'_{1\dots p} &= \int dx'^1 \dots dx'^p f'(x'^1, \dots, x'^p) \\ &= \int dx'^1 \dots dx'^p \det \left( \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \right) f(x^1(x'), \dots, x^p(x')). \end{aligned} \quad (8.55)$$

Die Gleichheit der rechten Seiten von (8.54) und (8.55) folgt nun aus der allgemeinen Formel für den Variablenwechsel bei Vielfachintegralen, wobei man die Determinante als **Jacobian** bezeichnet.<sup>13</sup>

Unsere obige Diskussion war auf den Fall  $p = d$  fokussiert. Falls  $p < d$ , können wir  $\omega$  über eine  $p$ -dimensionale Hyperfläche in  $d$  Dimensionen integrieren. Um dies in Koordinaten durchzuführen, müssen wir nur die Hyperfläche durch passende Koordinaten  $y^1, \dots, y^p$

<sup>13</sup> Zu beachten ist, dass in dieser Formel eigentlich der Betrag des Jacobians steht - wir finden also nur Übereinstimmung, falls sich die Orientierung unseres Koordinatensystems nicht ändert, was wir aber weiter oben indirekt vorausgesetzt haben.

parametrisieren. Außerdem können wir die  $p$ -Form  $\omega$  als  $p$ -Form auf unserer Hyperfläche auffassen. Wir integrieren also wieder eine  $p$ -Form über einen  $p$ -dimensionalen Raum. Dies geschieht völlig analog zum bereits diskutierten Fall  $p = d$ .

Zum Abschluss erwähnen wir noch den mit dem neuen Hilfsmittel der Differentialformen leicht formulierbaren **Verallgemeinerten Satz von Stokes**,

$$\int_C d\omega = \int_{\partial C} \omega. \quad (8.56)$$

Hierbei ist  $\partial C$  der Rand der  $(p + 1)$ -dimensionalen Hyperfläche  $C$  und  $\omega$  ist eine beliebige  $p$ -Form (Abb. 43).

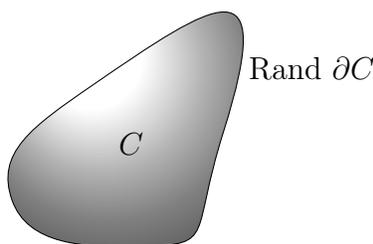


Abbildung 43: Hyperfläche  $C$  mit Rand  $\partial C$ .

## 9 Kanonische Transformationen, Integrabilität, Chaos

### 9.1 Kanonische Transformation

Die Lagrange-Formulierung der Mechanik ist invariant unter sogenannten **Punkttransformation**

$$q \rightarrow Q(q) \quad , \quad L(q, \dot{q}, t) \rightarrow L'(Q, \dot{Q}, t). \quad (9.1)$$

Dies sind Reparametrisierungen des Konfigurationsraums. Wir könnten auch  $Q(q, t)$  zulassen, tun dies aber zur Vereinfachung nicht.  $L'$  ist durch die naheliegende Forderung

$$L'(Q(q), \dot{Q}(q, \dot{q}), t) = L(q, \dot{q}, t) \quad (9.2)$$

definiert. Man prüft leicht nach, dass

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L'}{\partial \dot{Q}} - \frac{\partial L'}{\partial Q} = 0. \quad (9.3)$$

Aber eigentlich wissen wir schon, dass sich die Lagrange-Gleichungen nicht ändern werden: Wir können diese sowohl mit  $q$  als auch mit  $Q$  aus dem Hamilton-Prinzip ableiten. Letzteres basiert auf  $S$ , aber  $S$  hat sich nicht geändert, weil (an äquivalenten Punkten des Konfigurationsraumes)  $L = L'$  gefordert haben und sich  $S$  schlicht als Integral über  $L$  ergibt.

Betrachten wir das analoge Problem des Variablenwechsels in der Hamilton-Mechanik, also z.B.

$$q, p \rightarrow Q(q, p), P(q, p), \quad (9.4)$$

so sieht dies wegen der Aufteilung in Koordinaten und Impulse zunächst komplizierter aus. Wir müssen uns darüber klar werden, ob und wie wir diese Aufteilung beim Reparametrisieren verletzen dürfen oder respektieren müssen.

Die mit Abstand mächtigste Antwort auf diesen Fragenkreis kennen wir schon: Im letzten Kapitel ist es uns gelungen, die Hamilton-Mechanik mit Koordinaten  $\xi$ , einer Differentialform  $\omega$  (der symplektischen Struktur) sowie der Funktion  $H$  auf dem  $2n$ -dimensionalen Phasenraum zu definieren. In dieser Sprache gibt es keine Aufteilung in  $ps$  und  $qs$ . Die Objekte  $\omega$  und  $H$  sind koordinatenunabhängig, ebenso die Hamilton-Gleichungen in dieser Formulierung. Wir können also beliebige Variablenwechsel

$$\xi \rightarrow \xi'(\xi) \quad (9.5)$$

zulassen, so wie in der Lagrange-Mechanik.

Eine etwas speziellere und auch sehr nützliche Art des Koordinatenwechsels nennt man **kanonische Transformationen**. Hier fordern wir, dass sich die Form der Hamilton-Gleichungen unter (9.4) nicht ändert. Wir wissen, dass letztere aus  $\omega$  folgen und ihre einfache, vertraute Form annehmen, wenn  $\omega$  als Matrix die oben diskutierte Block-Gestalt hat. Es wird also reichen zu verlangen, dass diese Form von  $\omega$  sich nicht ändert:

$$\omega = dp_\alpha \wedge dq^\alpha = dP_\alpha(q, p) \wedge dQ^\alpha(q, p). \quad (9.6)$$

Kanonische Transformation sind demnach dadurch definiert, dass sie die explizite Form  $dp_\alpha \wedge dq^\alpha$  der symplektischen Struktur und damit die Form der Hamilton-Gleichungen (under der Poisson-Klammer) respektieren.

Explizit starten wir z.B. mit der **erzeugenden Funktion**<sup>14</sup>

$$F_2(q, P) \quad (9.7)$$

und definieren:

$$p = \frac{\partial F_2(q, P)}{\partial q} \quad \text{und} \quad Q = \frac{\partial F_2(q, P)}{\partial P}. \quad (9.8)$$

Durch Auflösen nach  $Q$  und  $P$  finden wir

$$Q = Q(q, p), \quad P = P(q, p). \quad (9.9)$$

Es gilt offenbar

$$dF_2 = \frac{\partial F_2}{\partial q} dq + \frac{\partial F_2}{\partial P} dP = p dq + Q dP. \quad (9.10)$$

Aus elementarer Sicht beschreibt dies die Änderung von  $F_2$  wenn wir die beiden Variablen  $q$  und  $P$  unabhängig, infinitesimal ändern. Aber wir können  $F_2$  auch als Funktion auf dem

---

<sup>14</sup> Es gibt auch äquivalente Definitionen durch  $F_1(q, Q)$ ,  $F_3(p, Q)$  und  $F_4(p, P)$  auf die wir aus Zeitgründen nicht eingehen. Sie sind durch Legendre-Transformationen verbunden. Außerdem könnten wir auch  $F_2(q, P, t)$  etc. zulassen, tun es aber nicht.

Phasenraum und demnach die obigen Gleichung als Gleichheit von 1-Formen auffassen. Mit der oben erwähnten Eigenschaft  $d^2 = 0$  folgt

$$0 = \underbrace{d(p dq + Q dP)}_{\text{Produktregel}} = dp \wedge dq + dQ \wedge dP, \quad (9.11)$$

wobei wir die Produktregel und nochmals  $d^2 = 0$  benutzt haben. Nun benutzen wir die Antisymmetrie des  $\wedge$ -Produktes und finden

$$0 = dp \wedge dq - dP \wedge dQ \quad \Rightarrow dp \wedge dq = dP \wedge dQ, \quad (9.12)$$

wie gewünscht.

All dies funktioniert natürlich ebenso mit vielen  $p_\alpha, q^\alpha$  sowie  $P_\alpha, Q^\alpha$  und entsprechenden Einstein-Summen.

$F_2$  generiert also eine bestimmte Klasse von Koordinatentransformationen, welche automatisch **kanonisch** sind. Wir erwarten, dass es auch ein spezielles  $F_2$  gibt, welches die Identität, also  $Q(q, p) = q$  und  $P(q, p) = p$  generiert. Man prüft leicht nach, dass

$$F_2(q, P) = qP \quad (\text{bzw. } F_2(q, P) = q^\alpha P_\alpha) \quad (9.13)$$

genau dies tut.

Eine Funktion, welche nur geringfügig von dieser speziellen Form abweicht, wird demnach **kleine** kanonische Transformationen generieren:

$$F_2(q, P) = qP + \varepsilon G(q, P). \quad (9.14)$$

Hier betrachten wir  $\varepsilon$  als infinitesimalen Parameter. Explizit haben wir

$$p = P + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial q}(q, P), \quad Q = q + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial P}(q, P). \quad (9.15)$$

Nun können wir aber in den Termen  $\mathcal{O}(\varepsilon)$  die Ersetzung  $P \rightarrow p$  machen. Der dadurch entstehende Fehler ist  $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ . In führender Ordnung in  $\varepsilon$  gilt also

$$p = P + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial q}(q, p), \quad Q = q + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial p}(q, p). \quad (9.16)$$

Es folgt, dass

$$\Delta p = P - p = -\varepsilon \frac{\partial G(q, p)}{\partial q} = \varepsilon \left( \frac{\partial p}{\partial q} \frac{\partial G}{\partial p} - \frac{\partial p}{\partial p} \frac{\partial G}{\partial q} \right) = \varepsilon \{p, G\} \quad (9.17)$$

$$\Delta q = Q - q = \varepsilon \frac{\partial G(q, p)}{\partial p} = \varepsilon \left( \frac{\partial q}{\partial q} \frac{\partial G}{\partial p} - \frac{\partial q}{\partial p} \frac{\partial G}{\partial q} \right) = \varepsilon \{q, G\}. \quad (9.18)$$

Es zeigt sich: Die durch  $F_2 = qP + \varepsilon G$  generierte infinitesimale kanonische Transformation entspricht der auf dem Phasenraum durch  $G$  (mittels der Poissonklammer) induzierten Bewegung.<sup>15</sup>

<sup>15</sup> In dieser letzten Interpretation sind wir vom passiven Standpunkt der Koordinatentransformation zum aktiven Standpunkt der Bewegung auf dem Phasenraum gewechselt. Dazu haben wir  $P - p$ , ursprünglich die Differenz der Koordinaten eines Punktes, als Koordinaten zweier verschiedener Punkte (vor und nach der Bewegung) aufgefasst.

## 9.2 Integrität

Wir beginnen mit der Definition von Integrität: Ein System mit  $n$  Freiheitsgraden heißt **integrabel**, wenn es  $n$  unabhängige Erhaltungsgrößen  $f_\alpha$  (mit  $\alpha = 1, \dots, n$ ) gibt, sodass deren sämtliche Poissonklammern verschwinden:

$$\{f_\alpha, f_\beta\} = 0. \quad (9.19)$$

Unabhängig heißt hierbei, dass die  $df_\alpha$  an jedem Punkt  $\xi$  des Phasenraumes  $M$  linear unabhängig in  $T_\xi^*M$  sind.

Die Bedeutung des Begriffs der Integrität folgt daraus, dass sich für solche Systeme stets eine kanonische Transformation finden lässt, sodass

$$P_\alpha = f_\alpha \quad (\alpha = 1, \dots, n) \quad (9.20)$$

die neuen kanonischen Impulse sind.

Die **Notwendigkeit** der Bedingung  $\{f_\alpha, f_\beta\}_{p,q} = 0$  sieht man demnach sofort: Sie folgt aus  $\{P_\alpha, P_\beta\}_{P,Q} = 0$  zusammen mit der Tatsache, dass die kanonischen Transformationen die Poissonklammer respektieren. Hierbei haben wir durch die Indizes  $p, q$  bzw.  $P, Q$  spezifiziert, in welchen Koordinaten jeweils die Poisson-Klammer zu berechnen ist.

Da nun nach der Transformation alle Impulse  $P$  konstant sind,

$$\dot{P}_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial Q^\alpha} = 0, \quad (9.21)$$

sind alle  $Q$ 's zyklisch. Die Bewegung ist also sehr einfach:

$$\dot{Q}^\alpha = \frac{\partial H(Q, P)}{\partial P_\alpha} = \frac{\partial H(P)}{\partial P_\alpha} = \text{const}_\alpha \quad \Rightarrow \quad Q^\alpha = Q_0^\alpha + t \cdot \frac{\partial H(P)}{\partial P_\alpha}. \quad (9.22)$$

Wir kennen auch schon zwei Beispiele integrierbarer Systeme:

- (1) Die eindimensionale Bewegung ( $n = 1$ , 1 Erhaltungsgröße:  $H$ ),
- (2) Das Zwei-Körper-Problem ( $n = 6$ , 6 Erhaltungsgrößen:  $H, \bar{P}; L_z, \bar{L}^2$ ).

Dass unsere Bedingung  $\{f_\alpha, f_\beta\}_{p,q} = 0$  auch **hinreichend** für die Durchführbarkeit der gewünschten kanonischen Transformation ist, zeigen wir durch explizite Konstruktion. Gegeben seien also  $n$  Erhaltungsgrößen  $f_\alpha(q, p)$ . Wir definieren:  $P_\alpha = f_\alpha(q, p)$  und lösen nach den 'alten'  $p_\alpha$  auf:

$$p_\alpha = p_\alpha(q, P). \quad (9.23)$$

Jetzt betrachten wir unseren Phasenraum als **Schichtung**, wobei jede Schicht durch die Konstanz aller  $P_\alpha$  definiert ist (Abb. 44).

In jeder Schicht (und damit auch global) definieren wir

$$F_2(q, P) = \int_{\{q_0^\alpha\}}^{\{q^\alpha\}} dq'^\beta p_\beta(q', P), \quad (9.24)$$

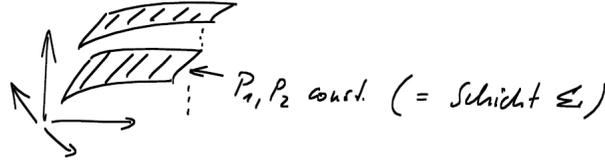


Abbildung 44: Versuch einer Illustration der Schichtungs-Struktur des Phasenraumes für  $n = 2$ .

mit  $\{q_0^\alpha\}$  als Startpunkt unseres Linienintegrals. Dieses Linienintegral ist nach dem verallgemeinerten Satz von Stokes ist wegunabhängig. Dazu berechnen wir zunächst

$$d(dq^\alpha p_\alpha)|_\Sigma = dp_\alpha \wedge dq^\alpha|_\Sigma = \omega|_\Sigma . \quad (9.25)$$

In der obigen Gleichung haben wir die Formen auf eine beliebige der Schichten (Hyperflächen)  $\Sigma$  eingeschränkt.

Jetzt betrachten wir die Vektorfelder  $V(P_\alpha)$ , welche die durch  $P_\alpha$  induzierten Bewegungen auf dem Phasenraum beschreiben. Da die  $P$ 's untereinander verschwindende Poisson-Klammern haben, bleiben alle  $P$ 's bei der durch ein  $P_\alpha$  induzierten Bewegung konstant. Also liegen die  $V(P_\alpha)$  im Tangentialraum zu  $\Sigma$  und spannen diesen aus Dimensionsgründen an jedem Punkt auf. Außerdem haben wir, nach dem in Abschnitt 8.4 zur Beziehung zwischen Poisson-Klammer und  $\omega$  gesagten,

$$0 = \{P_\alpha, P_\beta\} = \omega(V(P_\alpha), V(P_\beta)) . \quad (9.26)$$

Also gilt

$$d(dq^\alpha p_\alpha)|_\Sigma = \omega|_\Sigma = 0 , \quad (9.27)$$

so dass (9.24) wegunabhängig und  $F_2$  wohldefiniert ist.

Wir können den Weg also beliebig wählen, insbesondere zum Beispiel auch so, dass für ein gewisses  $\alpha \in \{1, \dots, n\}$  das letzte Stück parallel zur  $q^\alpha$ -Achse verläuft. Dann gilt (ohne Summation!)

$$\frac{\partial F_2}{\partial q^\alpha} = \frac{\partial}{\partial q^\alpha} \int^{q^\alpha} \oint dq'^\alpha p_\alpha(q^1, \dots, q'^\alpha, \dots, q^n, P) = p_\alpha . \quad (9.28)$$

Damit haben wir gezeigt, dass  $F_2$  das 'richtige' generierende Funktional ist für die von uns gesuchte kanonische Transformation ist. Wir definieren

$$Q^\alpha \equiv \frac{\partial F_2}{\partial P_\alpha} \quad (9.29)$$

und sind mit unserer expliziten Konstruktion der Transformation fertig.

Ohne Beweis zitieren wir noch folgenden wichtigen Fakt: Falls die  $\Sigma$ 's kompakt und zusammenhängend sind, so sind sie Tori (also  $\Sigma \sim T^n \sim (S^1)^n$ ). Die Aussagen dieses Abschnitts entsprechen in etwa dem, was man in einer präziseren Diskussion als Theorem von Liouville/Arnold bezeichnen würde.

### 9.3 Chaos

Betrachten wir die Bewegung eines kleinen sphärischen Volumens  $V(t = 0) \sim r^{2n}$  im Phasenraum (Abb. 45). Nach einer gewissen Zeit  $t$  werden wir ein anders geformtes Volumen an einem anderen Punkt des Phasenraums vorfinden. Man kann zeigen, dass die Deformation im Grenzwert  $r \rightarrow 0$  bei festem  $t$  einfach ist: Aus der Kugel wird ein Ellipsoid, dessen Volumen nach dem Satz von Liouville jedoch dem der Kugel gleich ist (Abb. 46):

$$V(0) = \frac{\pi^n}{n!} r^{2n} \quad \rightarrow \quad V(t) = \frac{\pi^n}{n!} \prod_{i=1}^{2n} a_i. \quad (9.30)$$

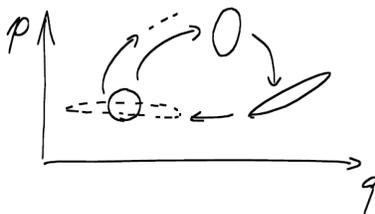


Abbildung 45: Bewegung im Phasenraum.



Abbildung 46: Kugel im Phasenraum transformiert zu Ellipsoid.

Da diese Dynamik von Differentialgleichungen 1. Ordnung beschrieben wird, ist das schnellstmögliche Wachstum von Abständen exponentiell (ohne Beweis):

$$a_i(t) \sim e^{\lambda_i t} \cdot r. \quad (9.31)$$

Wir erinnern daran, dass diese einfache Formel nur für sehr kleine  $r$  bei festem  $t$  gilt. Die  $\lambda_i$  heißen **Lyapunov-Exponenten**. Die genauere Definition lautet

$$\lambda_i \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{t} \ln \left( \frac{a_i(t)}{r} \right). \quad (9.32)$$

Wegen Liouville gilt:

$$\prod_{i=1}^{2n} (e^{\lambda_i t} \cdot r) = r^{2n} \quad \Rightarrow \quad \sum_{i=1}^{2n} \lambda_i = 0. \quad (9.33)$$

Für integrable Systeme sind die  $P$ 's konstant und für die  $Q$ 's ist nur lineares Wachstum möglich:

$$Q^\alpha = t \cdot \text{const.}^\alpha + Q_0^\alpha. \quad (9.34)$$

Wegen

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln t = 0 \quad (9.35)$$

verschwinden dann alle Lyapunov-Exponenten:  $\lambda_i = 0$  für  $i = 1, \dots, 2n$ .

**Chaotische Systeme** sind dadurch definiert, dass für mindestens ein  $i$  gilt:  $\lambda_i > 0$ . Da der Fall  $n = 1$  stets integrabel ist, kann man leider kein anschauliches Beispiel im 2-dimensionalen Phasenraum geben. Ein etwas künstliches Beispiel (welches nicht auf echter hamiltonscher Dynamik basiert) liefert jedoch die in Abb. 47 illustrierte ‘Bäckertransformation’.

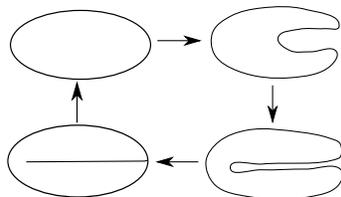


Abbildung 47: Bäckertransformation (Man denke an das Kneten von Teig).

Um diese genauer zu verstehen, berechnen wir den horizontalen Abstand zweier benachbarter Punkte (Abstand  $r$  bei  $t = 0$ ) nach  $N$  Perioden, wobei noch annehmen, dass die Periodendauer  $\tau$  ist:

$$a_1 = 2^N r = 2^{t/\tau} \cdot r. \quad (9.36)$$

Wir finden somit

$$\lambda_1 = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{t} \ln \left( \frac{2^{t/\tau} r}{r} \right) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln (2^{t/\tau}) = \frac{1}{\tau} \ln(2) > 0, \quad (9.37)$$

also Chaos.

Anderes Beispiel liefert ein ‘Billardtisch’ mit perfekter Reflexion am Rand (Abb. 48): Falls dieser rund ist, sind  $H$  und  $L$  erhalten und das System ist integrabel. Bei allgemein geformtem Rand ist nur  $H$  erhalten und das System ist chaotisch.

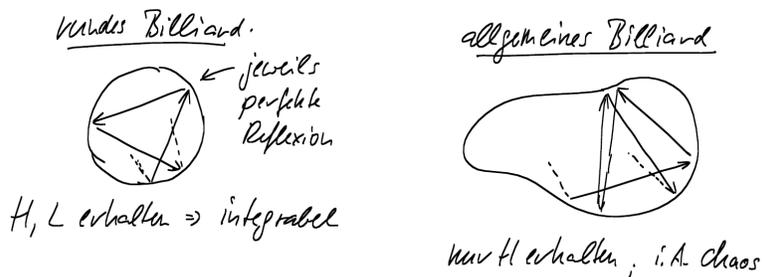


Abbildung 48: Rundes und allgemeines Billiard.

# 10 Schwingungen und Kontinua

## 10.1 Kleine Schwingungen allgemeiner Systeme

### 10.1.1 Ein Freiheitsgrad

Zeitunabhängigkeit vorausgesetzt, lautet die allgemeine Lagrange-Funktion eines eindimensionalen Systems

$$L = \frac{1}{2}f(q)\dot{q}^2 - V(q). \quad (10.1)$$

Sei  $q_0$  eine Ruhelage. Das impliziert  $V'(q_0) = 0$ . Wir definieren nun eine neue Koordinate  $\tilde{q}$  durch  $q = q_0 + \tilde{q}$ . Anschließend benennen wir um,  $\tilde{q} \rightarrow q$ , und finden so die äquivalente Lagrange-Funktion

$$L = \frac{1}{2}f(q_0 + q)\dot{q}^2 - V(q_0 + q) = \frac{1}{2}f(q_0)\dot{q}^2 - V(q_0) - \frac{1}{2}V''(q_0)q^2 + \mathcal{O}(q^3) + \dot{q}^2 \mathcal{O}(q). \quad (10.2)$$

Wir haben hier bis zur quadratischen Ordnung in  $q$  bzw.  $\dot{q}$  Taylor-entwickelt. Die irrelevante Konstante  $V(q_0)$  können wir weglassen, bei kleinen Auslenkungen  $q$  auch die höheren Terme. Wir haben es demnach mit

$$L \simeq \frac{1}{2}f(q_0)\dot{q}^2 - \frac{1}{2}V''(q_0)q^2, \quad (10.3)$$

also einem harmonischer Oszillator mit  $\omega = \sqrt{V''/f}$  zu tun, und zwar **völlig unabhängig** von den Details des ursprünglichen Systems!

### 10.1.2 Viele Freiheitsgrade

Jetzt starten wir mit

$$L = \frac{1}{2}f_{ij}(q)\dot{q}_i\dot{q}_j - V(q), \quad q \equiv \{q_1, \dots, q_n\}. \quad (10.4)$$

Sei  $q_0 \equiv \{q_1^{(0)}, \dots, q_n^{(0)}\}$  eine Ruhelage, also

$$\frac{\partial V}{\partial q_i}(q_0) = 0 \quad \forall i. \quad (10.5)$$

Wie oben ersetzen wir die Variablen gemäß  $q \rightarrow q_0 + q$ , so dass

$$L = \frac{1}{2}f_{ij}(q_0 + q)\dot{q}_i\dot{q}_j - V(q_0 + q). \quad (10.6)$$

Jetzt wenden wir die Formel für Taylor-Entwicklung in mehreren Variablen an:<sup>16</sup>

$$f(\bar{x}) = f(\bar{0}) + x^i \frac{\partial}{\partial x^i} f(0) + \frac{1}{2!} x^i x^j \frac{\partial}{\partial x^i} \frac{\partial}{\partial x^j} f(0) + \frac{1}{3!} x^i x^j x^k \frac{\partial}{\partial x^i} \frac{\partial}{\partial x^j} \frac{\partial}{\partial x^k} f(0) + \dots \quad (10.7)$$

---

<sup>16</sup> Wir geben hier keinen Beweis, siehe aber die entsprechende Übungsaufgabe.

Indem wir uns sowohl in  $T$  als auch in  $V$  auf den führenden nichtkonstanten Term beschränken, finden wir

$$L \approx \frac{1}{2} f_{ij}(q_0) \dot{q}_i \dot{q}_j - \frac{1}{2} V_{ij}(q_0) q_i q_j \quad \left( V_{ij} \equiv \frac{\partial^2 V}{\partial x^i \partial x^j} \right). \quad (10.8)$$

Wir können nun o.B.d.A. annehmen, dass  $f_{ij}$  symmetrisch ist. Dann existiert also ein  $R \in SO(n)$ , sodass  $R \cdot f \cdot R^{-1}$  diagonal ist:

$$R \cdot f \cdot R^{-1} = \text{diag}(a_1, \dots, a_n). \quad (10.9)$$

Dies können wir ausnutzen, indem wir zu ‘gestrichenen’ Variablen übergehen, welche durch

$$q_i \equiv (R^T)_{ij} q'_j \quad (10.10)$$

definiert sind. Es folgt dann

$$L = \frac{1}{2} \dot{q}'_i R_{ij} f_{jk} R_{kl}^T \dot{q}'_l - \frac{1}{2} q'_i R_{ij} V_{jk} R_{kl}^T q'_l = \frac{1}{2} \sum_i a_i (\dot{q}'_i)^2 - \frac{1}{2} q'_i M_{ij} q'_j, \quad (10.11)$$

wobei wir der Kürze halber

$$M_{ij} = R_{ik} V_{kl} R_{lj}^T \quad (10.12)$$

definiert haben. Wir wechseln jetzt die Variablen erneut,  $q'_i \equiv q''_i / \sqrt{a_i}$ , und finden somit

$$L = \frac{1}{2} \sum_i (\dot{q}''_i)^2 - \frac{1}{2} \sum_{ij} q''_i \frac{M_{ij}}{\sqrt{a_i a_j}} q''_j. \quad (10.13)$$

Wir definieren  $K_{ij} \equiv M_{ij} / \sqrt{a_i a_j}$  und gehen zur Matrix-Notation über:

$$L = \frac{1}{2} (\dot{q}''^T)^T \cdot \mathbb{1} \cdot \dot{q}'' - \frac{1}{2} (q''^T)^T K q''. \quad (10.14)$$

Da  $K$  symmetrisch ist, existiert ein  $\tilde{R} \in SO(n)$  sodass  $\tilde{R} \cdot K \cdot \tilde{R}^T = \text{diag}(k_1, \dots, k_n)$ . Wieder wechseln wir die Variablen,  $q'' \equiv \tilde{R}^T q'''$ , und haben nunmehr die Lagrange-Funktion

$$L = \frac{1}{2} (\dot{q}'''^T)^T \cdot \mathbb{1} \cdot \dot{q}''' - \frac{1}{2} q'''^T (\tilde{R} \cdot K \cdot \tilde{R}^T) q''' \quad (10.15)$$

Jetzt machen wir noch eine letzte Umbenennung,  $q''' \rightarrow q$ , und haben mit

$$L = \sum_i \left( \frac{1}{2} \dot{q}_i^2 - \frac{1}{2} k_i q_i^2 \right) \quad (10.16)$$

ein System von  $n$  unabhängigen harmonischen Oszillatoren mit Frequenz  $\omega_i = \sqrt{k_i}$ . Dieses Ergebnis erklärt die überwältigende Bedeutung des harmonischen Oszillators in der Physik.

Zu beachten ist noch, dass ein mathematisch denkbare  $a_i < 0$  für gewisse  $i$  unphysikalisch ist – die kinetische Energie muss positiv sein. Es ist durchaus möglich, dass (für gewisse  $i$ )  $k_i < 0$ . Dann war die Ruhelage war instabil. Falls  $k_i = 0$  für gewisse  $i$ , ist unsere  $O(q^2)$ -Analyse unzureichend, um zu entscheiden, ob der entsprechende Freiheitsgrad stabil oder instabil ist.

## 10.2 Lineare Kette

Als Einstieg in die Kontinua betrachten die in Abb. 49 dargestellte ‘lineare Kette’ mit

$$L = \sum_i \frac{m}{2} \dot{q}_i^2 - \sum_i \frac{k}{2} (q_{i+1} - q_i)^2 . \quad (10.17)$$

Hier ist  $(q_{i+1} - q_i)$  die Längenänderung der als masselos angenommenen Feder zwischen  $i$  und  $i + 1$ .

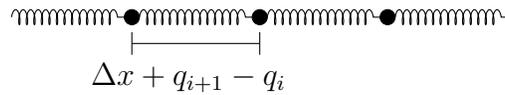


Abbildung 49: Skizze einer linearen Kette mit ungespannten Federn der Länge  $\Delta x$ . Die Variablen  $q_i$  bezeichnen die Auslenkung vom Massenpunkt  $i$  aus seiner Ruhelage.

Wir könnten die Analyse von 10.1 anwenden, aber es ist noch interessanter, gleich den **Kontinuumsimes** zu nehmen. Dazu gehen wir von dem diskreten Satz von Variablen  $q_i$  zu ortsabhängigen Auslenkung  $q(x)$  der Massenpunkte in Kettenrichtung über (Abb. 50). Transversale Auslenkungen sind nicht zugelassen!

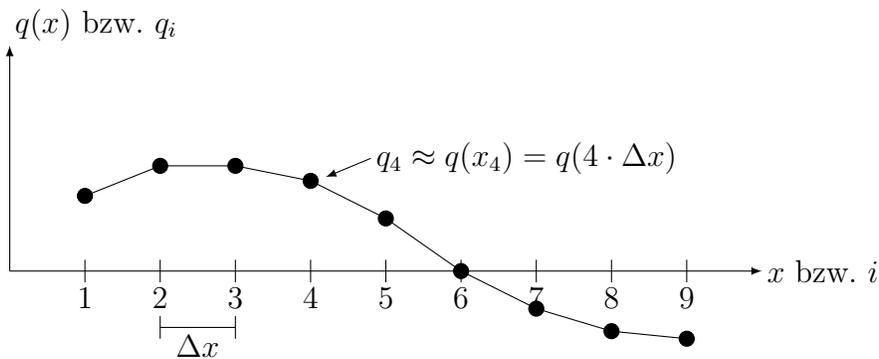


Abbildung 50: Bildung des Kontinuumslimes.

Wir bezeichnen also mit  $x$  die Ortskoordinate der Kette, mit  $q_i = q(x_i)$  die Auslenkung am Ort  $x_i$  und mit

$$q'(x_i) = \frac{q_{i+1} - q_i}{\Delta x} \quad (10.18)$$

die ‘diskrete Version’ der Ableitung der Funktion  $q(x)$ . Es folgt

$$L = \sum_i \left[ \frac{m}{2} \dot{q}(x_i)^2 - \frac{k}{2} q'(x_i)^2 \cdot \Delta x^2 \right] = \sum_i \Delta x \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{m}{\Delta x} \right) \dot{q}(x_i)^2 - \frac{k \cdot \Delta x}{2} q'(x_i)^2 \right] . \quad (10.19)$$

Jetzt nehmen wir den Limes  $\Delta x \rightarrow 0$ ,  $m \rightarrow 0$ ,  $k \rightarrow \infty$ , sodass aber  $b = k \cdot \Delta x$  (Kompressionsmodul) und  $\rho = m/\Delta x$  (Liniendichte) konstant bleiben. Dann gilt mit  $q = q(x, t)$ :

$$L = \int dx \left( \frac{\rho}{2} \dot{q}^2 - \frac{b}{2} q'^2 \right) . \quad (10.20)$$

Damit haben wir unsere erste einfache (2-dimensionale) Feldtheorie mit dem ‘Feld’  $q(x, t)$  hergeleitet:

$$S = \int dt L = \int dt dx \mathcal{L} = \int dt dx \left( \frac{\rho}{2} \dot{q}^2 - \frac{b}{2} q'^2 \right). \quad (10.21)$$

Zu den bekannten Begriffen der Wirkung  $S$ , der Lagrange-Funktion  $L$  kommt jetzt die Lagrange-Dichte oder der Lagrangian  $\mathcal{L}$ .

Die Bewegungsgleichungen folgen wie bisher aus dem Hamilton-Prinzip:

$$\begin{aligned} 0 \stackrel{!}{=} \delta S &= \int dt dx \left( \frac{\rho}{2} \delta(\dot{q}^2) - \frac{b}{2} \delta(q'^2) \right) = \int dt dx (\rho \dot{q} \delta \dot{q} - b q' \delta q') \\ &= \int dt dx (-\rho \cdot \ddot{q} + b \cdot q'') \delta q + \text{Randterme}. \end{aligned} \quad (10.22)$$

Da  $\delta q(x, t)$  beliebig ist, muss der Integrand im letzten Ausdruck identisch verschwinden. Wir haben mit

$$\ddot{q} - c^2 q'' = 0 \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial^2 q(t, x)}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 q(t, x)}{\partial x^2} = 0 \quad (10.23)$$

eine einfache **Wellengleichung** mit Ausbreitungsgeschwindigkeit  $c^2 \equiv b/\rho$  gefunden.

Der echte, elastische Festkörper kann durch eine 3d-Verallgemeinerung der obigen Wirkung beschrieben werden:

$$q(x, t) \rightarrow \bar{q}(\bar{x}, t) = \{q^1(\bar{x}, t), \dots, q^3(\bar{x}, t)\} \equiv \{q^i(\bar{x}, t)\}. \quad (10.24)$$

Hierbei ist  $q^1$  die Auslenkung in  $x^1$ -Richtung etc. Die beiden Terme der obigen Lagrange-Dichte verallgemeinern sich wie folgt:

$$\int dx \frac{\rho}{2} \dot{q}^2 \rightarrow \int d^3x \frac{\rho}{2} \dot{\bar{q}}^2 \quad (10.25)$$

$$\int dx \frac{b}{2} q'^2 \rightarrow \int d^3x \frac{1}{2} b_{ij,kl} \left( \frac{\partial}{\partial x^i} q^j \right) \left( \frac{\partial}{\partial x^k} q^l \right). \quad (10.26)$$

Hierbei kodiert  $b_{ij,kl}$  verschiedene elastische Eigenschaften des Festkörpers. Es gibt dementsprechend auch verschiedene Wellen: Kompressions-, Scherungs-, Verdrillungswellen.

### 10.3 Schwingende Saite

Neben einem schönen mechanischen System, stellt die eingespannete, schwingende Saite ein besonders einfaches ‘Spielzeugmodell’ für eine nichtrelativistische, klassische Stringtheorie dar (Abb. 51).

Im Gegensatz zur Kette ist Auslenkung orthogonal zur  $x$ -Achse erlaubt und wird sogar als dominierender Effekt angenommen. Zur **Newtonschen Herleitung** der Bewegungsgleichungen betrachten wir Abb. 52. Nach Newton gilt für das infinitesimale Stück

$$\rho dx \ddot{q}(x) = (\bar{F}_2 + \bar{F}_1)|_{\perp}. \quad (10.27)$$

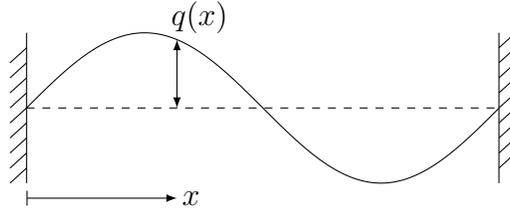


Abbildung 51: Schwingende Saite.

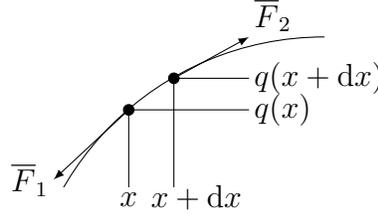


Abbildung 52: Kräftebilanz für ein kleines Stück der Saite.

Sei  $F$  der Betrag der Kraft, mit der die Saite gespannt ist. (Kraftänderung durch Längenänderung wird vernachlässigt  $\Delta F/F \ll 1$ .) Dann gilt:

$$(\overline{F}_2)_\perp = F \cdot \sin \theta \approx F \cdot \tan \theta = F \cdot \frac{dq}{dx} = F \cdot q'(x + dx), \quad (10.28)$$

wobei  $\theta$  der Winkel mit der Horizontalen ist. Das Argument  $x + dx$  im letzten Ausdruck ergibt sich, weil die Betrachtung *rechts* am infinitesimalen Stück erfolgt. Demnach folgt *links* analog:

$$(\overline{F}_1)_\perp = -F \cdot q'(x). \quad (10.29)$$

Also finden wir

$$\rho dx \ddot{q}(x) = F \cdot [q'(x + dx) - q'(x)] \Rightarrow \rho \cdot \ddot{q} - F \cdot q'' = 0 \Rightarrow \ddot{q} - c^2 \cdot q'' = 0, \quad (10.30)$$

mit  $c^2 = F/\rho$ .

Die **Lagrangesche Herleitung** ist noch einfacher: Man überlegt sich sofort, dass

$$T = \int dx \frac{\rho}{2} \dot{q}^2, \quad \text{und} \quad V = F \cdot \Delta x = F \cdot \left[ \int \sqrt{dx^2 + dy^2} - \int dx \right], \quad (10.31)$$

wobei  $\Delta x$  die gesamte Längenänderung der Saite ist. Elementare Geometrie liefert nun

$$V = F \cdot \int dx \left( \sqrt{1 + q'^2} - 1 \right) \simeq \int dx \frac{F}{2} q'^2, \quad (10.32)$$

sodass

$$\mathcal{L} = \frac{\rho}{2} \dot{q}^2 - \frac{F}{2} q'^2. \quad (10.33)$$

Dies hat exakt die gleiche Form wie bei der Kette, aber mit  $b \rightarrow F$ . Wir finden also wieder

$$\ddot{q} - c^2 \cdot q'' = 0, \quad (10.34)$$

aber diesmal mit  $c^2 = F/\rho$ , in Übereinstimmung mit Newton.

Lösungen sind z.B.

$$q(x, t) = A \cdot \cos [k(x - ct)] \quad \text{und} \quad q(x, t) = B \cdot \sin [k(x - ct)], \quad (10.35)$$

mit  $A, B, k$  beliebig. Da die Gleichung linear ist, ist auch

$$q(x, t) = \int dk [A(k) \cdot \cos [k(x - ct)] + B(k) \sin [k(x - ct)]] \quad (10.36)$$

eine Lösung. Hierbei treten mit  $A(k)$  und  $B(k)$  frei wählbare Funktionen in der Lösung auf. Letzteres ist eine allgemeine Eigenschaft der **partiellen Differentialgleichungen**. Der Name kommt daher, dass in  $t$  **und**  $x$  jeweils partielle Ableitungen in der Gleichung vorkommen.  $A(k)$  und  $B(k)$  können benutzt werden, um die **Anfangsbedingungen**  $q(x, 0)$  und  $\dot{q}(x, 0)$  zu erfüllen. Außerdem haben wir im Allgemeinen noch **Randbedingungen** (zum Beispiel bei  $x = 0$  und  $x = L$ ) zu erfüllen.

Speziell für die Randbedingung  $q(0) = q(L) = 0$  finden wir nur *diskrete* erlaubte Werte für  $k$  sowie bestimmte Relation zwischen  $A$  und  $B$ . Es kommt dann zu stehenden Wellen. Wenn wir uns bei diesen dann auf hinreichend kleine  $k$  beschränken, ist unser Kontinuumslimites im Fall der Kette ‘a posteriori’ gerechtfertigt.

## 10.4 Ideale Hydrodynamik

Der englische Name, (ideal) fluid dynamics, beschreibt dieses Thema eigentlich besser, weil das Folgende auch auf Luft, Teer, Glas, Dunkle Materie etc. angewandt werden kann. Wir werden hier keine mikroskopische Beschreibung versuchen – wir reden nur von “Flüssigkeitszellen”, die zwar sehr klein sind, aber doch jeweils sehr viele Teilchen enthalten (Abb. 53).

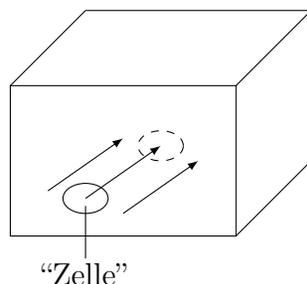


Abbildung 53: Strömende Flüssigkeit mit (gedachter) Zelle.

Wir arbeiten mit den Feldern für Geschwindigkeit, Dichte, Druck etc.:  $\bar{v}(\bar{x}, t)$ ,  $\rho(\bar{x}, t)$ ,  $p(\bar{x}, t)$  – es handelt sich bei der Hydrodynamik also um eine ganz spezielle **Feldtheorie**. Die Anwendung von **Newton** für eine Zelle lautet:

$$m \cdot \frac{d\bar{v}}{dt} = \bar{F}. \quad (10.37)$$

Die hier vorkommende Ableitung  $d/dt$  bezieht sich auf eine bestimmte, sich bewegende Zelle und wird **Materialableitung** (**substantial** oder **material derivative**) genannt. Aus Sicht der Feldtheorie kann man sie als

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{dx^i}{dt} \frac{\partial}{\partial x^i} = \frac{\partial}{\partial t} + \bar{v} \cdot \bar{\nabla} \quad (10.38)$$

umschreiben.

Die auf eine Zelle wirkende Kraft zerfällt in äußere Kraft (z.B. Gravitation, Magnetfeld) und Druckkraft,

$$\bar{F} = \bar{F}_{\text{äuß}} + \bar{F}_p. \quad (10.39)$$

Letztere wiederum ergibt sich als Oberflächenintegral:

$$\bar{F}_p = - \int_O p d\bar{f}, \quad (10.40)$$

mit  $d\bar{f}$  als Flächenvektor. Wir können nun z.B. die erste Komponente dieser Kraft mit Gauß in ein Volumenintegral umrechnen:

$$\hat{e}_1 \cdot \bar{F}_p = - \int_O (\hat{e}_1 p) \cdot d\bar{f} = - \int_V \nabla \cdot (\hat{e}_1 p) dV = - \int_V \frac{\partial}{\partial x^1} (p) dV = - \hat{e}_1 \cdot \int_V (\bar{\nabla} p) dV. \quad (10.41)$$

Eine analoge Rechnung mit  $\hat{e}_2$  und  $\hat{e}_3$  führt zum gleichen Ergebnis, jeweils mit  $\hat{e}_2$  und  $\hat{e}_3$  an der Stelle von  $\hat{e}_1$ . Die Kombination von (10.41) mit diesen beiden analogen Gleichungen zeigt, dass die Vektor-Gleichung

$$\bar{F}_p = - \int_V (\bar{\nabla} p) dV \quad (10.42)$$

gilt.

Jetzt setzen wir (10.38), (10.39) sowie unseren letzten Ausdruck für  $\bar{F}_p$  in die Newtonsche Grundgleichung ein und teilen durch das Volume  $V_z$  der Zelle:

$$\rho \cdot \left( \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + (\bar{v} \cdot \bar{\nabla}) \bar{v} \right) = - \bar{\nabla} p + \frac{\bar{F}_{\text{äuß}}}{V_z}. \quad (10.43)$$

Jetzt teilen wir noch durch  $\rho$  und schreiben den letzten Term um

$$\frac{\bar{F}_{\text{äuß}}}{\rho V_z} = \frac{\bar{F}_{\text{äuß}}}{(m_z/V_z) V_z} = \frac{\bar{F}_{\text{äuß}}}{m_z} \equiv \bar{f}_{\text{äuß}}, \quad (10.44)$$

wobei wir im finalen Schritt die auf die Flüssigkeitsmasse bezogene ‘Äußeren Kraftdichte’ definiert haben. (Achtung: Dieses  $\bar{f}_{\text{äuß}}$  hat *nichts* mit dem Flächenelement  $d\bar{f}$  zu tun.) Es folgt schließlich die **Eulergleichung**:

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + (\bar{v} \cdot \bar{\nabla}) \bar{v} = - \frac{\bar{\nabla} p}{\rho} + \bar{f}_{\text{äuß}}. \quad (10.45)$$

Dazu kommt noch die Massenerhaltung (= Kontinuitätsgleichung). Um diese zu formulieren, definieren wir zunächst das Vektorfeld  $\vec{j} \equiv \rho \vec{v}$ . Es ist anschaulich klar, dass das Produkt von diesem Vektor mit dem  $d\vec{f}$  einer kleinen, in der Strömung stehenden Fläche gerade den Massenstrom ( $\vec{j} \cdot d\vec{f} = \text{Masse}/\text{Zeit}$ ) durch diese gedachte Fläche charakterisiert.

Jetzt wählen ein festes (gedachtes) Volumen in der Flüssigkeit und berechnen den Massenstrom aus diesem Volumen:

$$\int_O d\vec{f} \cdot \vec{j} = \int_V (\nabla \cdot \vec{j}) dV. \quad (10.46)$$

Dies muss natürlich der Massenabnahme

$$-\frac{\partial}{\partial t} \int \rho dV = - \int_V \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} \right) dV \quad (10.47)$$

in diesem Volumen entsprechen. Da wir zu beliebig kleinen  $V$  übergehen können, müssen die Integranden gleich sein und es folgt die **Kontinuitätsgleichung**:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0. \quad (10.48)$$

All das reicht aber immer noch nicht zur Beschreibung der Flüssigkeit: Wir brauchen noch die **Zustandsgleichung**  $p = p(\rho)$ . (Dies ist nur der einfachste Fall, bei dem wir Wärmeaustausch und Dissipation im "Fluid" ausschließen.) Ein Beispiel ist die Adiabatangleichung  $p \sim \rho^\kappa$  des idealen Gases.

Wir haben nun schließlich mit **Eulergleichung** + **Kontinuitätsgleichung** + **Zustandsgleichung** fünf Gleichungen (davon vier partielle Differentialgleichungen) für die fünf Felder  $\rho, p, \vec{v}$ . Das Problem ist damit prinzipiell gelöst.

Als einfache Anwendung leiten wir die **Bernoulli-Gleichung** ab. Dazu machen wir die Annahme, die Flüssigkeit sei **inkompressibel**,  $\rho = \text{const.}$ , und die Strömung sei **stationär**,  $\partial \vec{v} / \partial t = 0$ . Es folgt zunächst

$$(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \vec{f}_{\text{äuß}}. \quad (10.49)$$

Jetzt beschränken wir uns noch auf konservative äußere Kräfte,  $\vec{f}_{\text{äuß}} = -\nabla V$ , wobei  $V$  das spezifische (auf die Stoffmasse bezogene) Potential ist. Damit haben wir

$$(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} + \nabla \left( \frac{p}{\rho} + V \right) = 0 \quad (10.50)$$

und schließlich mit  $\vec{v} \cdot \nabla \equiv d/dt$  (siehe weiter oben) sowie nach Multiplikation mit  $\vec{v}$ :

$$\vec{v} \cdot \frac{d}{dt} \vec{v} + (\vec{v} \cdot \nabla) \left( \frac{p}{\rho} + V \right) = 0. \quad (10.51)$$

Jetzt benutzen wir wieder  $\vec{v} \cdot \nabla \equiv d/dt$  und finden

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{1}{2} \vec{v}^2 + \frac{p}{\rho} + V \right) = 0 \quad (10.52)$$

beziehungsweise die **Bernoulli-Gleichung**:

$$\frac{1}{2} \cdot \bar{v}^2 + \frac{p}{\rho} + V = \text{const.} \quad (\text{gilt entlang der Flusslinien}). \quad (10.53)$$

Letztlich ist dies schlicht Energieerhaltung.

## 10.5 Potentialströmungen

Unter gewissen Annahmen, bleibt die Eigenschaft der **Wirbelfreiheit** für immer erhalten: Falls,  $\bar{\nabla} \times \bar{v} = 0$  zu einer bestimmten Zeit gilt, bleibt dies für immer so.

Dies kann man aus **Kelvin's-Theorem** ableiten, welches besagt, dass die **Zirkulation**

$$\oint_C \bar{v} \cdot d\bar{s} \quad (10.54)$$

für barotrope Strömungen im konservativen Kraftfeld erhalten ist.<sup>17</sup> Hier ist  $C$  eine mit der Strömung fließende geschlossene Kurve und **barotrop** heißt, dass es eine Funktion  $p = p(\rho)$  gibt. Letzteres gilt insbesondere dann, wenn die Entropie (siehe später) erhalten bleibt. Dies wiederum erfordert, dass es keine (innere) Reibung gibt, was wir im Moment natürlich annehmen. Wir beweisen Kelvin's Theorem nicht.

Bei Wirbelfreiheit existiert ein (Geschwindigkeits-)Potential  $\varphi$ , nicht zu verwechseln mit  $V$ , sodass

$$\bar{v} = \bar{\nabla} \varphi. \quad (10.55)$$

Der Beweis ist analog zu dem beim konservativen Kraftfeld.

Wir nehmen weiterhin Inkompressibilität an. Dann gilt

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \nabla \cdot \bar{v} = 0 \quad \Rightarrow \quad \nabla \cdot (\bar{\nabla} \varphi) = 0 \quad \Rightarrow \quad \Delta \varphi = 0. \quad (10.56)$$

Letzteres ist die uns schon vom Gravitationspotential im leeren Raum bekannte **Laplace-Gleichung**. Diese ist eine **lineare** Gleichung, was gegenüber der **nichtlinearen** Euler-Gleichung eine gewaltige Vereinfachung darstellt – es gibt im linearen Fall viel mächtigere Methoden zur Lösung.

Noch besser wird es in  $d = 2$ , wo wir zusätzlich noch ein zur Geschwindigkeit ‘duales’ Feld  $\bar{u}$  durch

$$u_i \equiv -\varepsilon_{ij}^{(2d)} v_j \quad (10.57)$$

definieren können. Für dieses gilt dann (mit einer künstlich eingeführten dritten Dimension, von der nichts abhängt):

$$(\bar{\nabla} \times \bar{u})_3 = \varepsilon_{3ij}^{(3d)} \partial_i u_j = \varepsilon_{ij}^{(2d)} \partial_i u_j = -\varepsilon_{ij}^{(2d)} \partial_i \varepsilon_{jk}^{(2d)} v_k = \delta_{ik} \partial_i v_k = \bar{\nabla} \cdot \bar{v} = 0. \quad (10.58)$$

---

<sup>17</sup> Man bezeichnet diese Aussage (bzw. Variationen davon), weil sie auf William Thomson, 1. Baron Kelvin zurückgeht, gelegentlich auch als Thomson-Theorem.

Es existiert demnach ein Potential  $\psi$  mit  $\varepsilon_{ij}v_j = -\partial_i\psi$  beziehungsweise

$$v_1 = \partial_2\psi \quad (10.59)$$

$$v_2 = -\partial_1\psi. \quad (10.60)$$

(Man beachte den Unterschied zu  $v_1 = \partial_1\varphi$  und  $v_2 = \partial_2\varphi$  für das normale Geschwindigkeits-Potential.)

Dieses neue Potential  $\psi$  heißt Strömungsfunktion, weil Strömungslinien den Linien mit  $\psi = \text{const.}$  entsprechen. (Letzteres macht man sich leicht klar, weil  $\bar{v} \cdot \bar{\nabla}\psi = v_i(-\varepsilon_{ij}v_j) = 0$ .)

Mit der Umbenennung  $1, 2 \rightarrow x, y$  gelten dann für  $\varphi$  und  $\psi$  die sogenannten **Cauchy-Riemannschen Differentialgleichungen**:

$$\partial_x\varphi = \partial_y\psi \quad (10.61)$$

$$\partial_y\varphi = -\partial_x\psi. \quad (10.62)$$

Letzteres ist aber äquivalent zur Existenz einer **holomorphen** Funktion  $w = w(z)$  mit  $z = x + iy$  und

$$\varphi = \text{Re } w(z) \quad (10.63)$$

$$\psi = \text{Im } w(z). \quad (10.64)$$

Holomorph heißt für uns im Moment nur: Wenn  $w$  als Potenzreihe in  $z$  und  $\bar{z}$  geschrieben wird, dann gibt es nur Terme mit  $z$  und *keine* Terme mit  $\bar{z}$ . So ist z.B.  $w(z) = z^3$  holomorph, aber  $w(z, \bar{z}) = z^2\bar{z}$  ist es nicht.

Wir haben jetzt die sehr starke Aussage hergeleitet, dass jedes holomorphe  $w(z)$  eine ideale 2d-Strömung beschreibt. Es gilt weiterhin, dass sogenannte **konforme Transformationen** der Ebene,

$$f : z \rightarrow f(z), \quad (10.65)$$

aus einem gegebenen  $w(z)$  eine neue holomorphe Funktion  $w'(z) \equiv w(f(z))$  machen. Somit kann man durch konforme Transformationen aus konsistenten Strömungen neue konsistente Strömungen gewinnen. Das ist eine sehr mächtige Methode zur Beschreibung von Strömungen in 2 Dimensionen.

## 10.6 Navier-Stokes-Gleichungen

Wir wollen jetzt über die "ideale" Hydrodynamik hinausgehen, indem wir **Viskosität** (innere Reibung) zulassen. Dies führt zu der sehr wichtigen Navier-Stokes-Gleichung, wobei wir hier allerdings nur die Idee der Herleitung skizzieren können.

Wir starten zunächst wieder bei der idealen Hydrodynamik und setzen zur Vereinfachung sogar noch  $\bar{f} \equiv 0$ . Euler sagt dann

$$\rho \left( \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} - (\bar{v} \cdot \bar{\nabla}) \bar{v} \right) = -\bar{\nabla} p. \quad (10.66)$$

Unter Ausnutzung der Kontinuitätsgleichung kann dies umgeschrieben werden als

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(p\delta_{ij} + \rho v_i v_j) = 0. \quad (10.67)$$

Wir definieren jetzt

$$\Pi_{ij} \equiv p\delta_{ij} + \rho v_i v_j. \quad (10.68)$$

Die Komponenten dieses ‘Impuls-Fluss-Tensors’ beschreiben den Fluss vom Impuls in  $i$ -Richtung durch die Fläche orthogonal zu  $j$ .

Wir sehen, dass die Eulergleichung,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}\Pi_{ij} = 0, \quad (10.69)$$

letztlich nur Impulserhaltung beinhaltet.

Jetzt gehen wir über den idealen Fall hinaus: Der Impuls-Fluss-Tensor lautet allgemeiner

$$\Pi_{ij} = \sigma_{ij} + \rho v_i v_j. \quad (10.70)$$

Der erste Term heißt Spannungstensor und beschreibt die Kräfte, welche die Flüssigkeit auf sich selbst ausübt. Oben hatten wir nur den Druck-Anteil,  $\sigma_{ij} = p\delta_{ij}$ . Diesen wollen wir jetzt ergänzen, indem wir schreiben

$$\sigma_{ij} = p\delta_{ij} + \sigma'_{ij}. \quad (10.71)$$

Ursache für  $\sigma'$  ist die innere Reibung, vgl. Abb. 54.



Abbildung 54: Zur Inneren Reibung.

Ein nichttriviales Ergebnis, welches insbesondere Drehimpulserhaltung ausnutzt, ist folgendes: Die allgemeinste konsistente Form von  $\sigma'$ , in führender Ordnung in den als klein angenommenen Größen  $\frac{\partial v_i}{\partial x_j}$ , lautet

$$\sigma'_{ij} = \eta \cdot \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) + \mu \cdot \delta_{ij}(\bar{\nabla} \cdot \bar{v}). \quad (10.72)$$

Wenn wir jetzt wieder zum inkompressiblen Fall vereinfachen, fällt der Term mit der Divergenz weg und es ergibt sich nach weiterer Umschreibung die **Navier-Stokes-Gleichung**:

$$\rho \left( \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + (\bar{v} \cdot \bar{\nabla})\bar{v} \right) = -\bar{\nabla} p + \eta \Delta \bar{v}. \quad (10.73)$$

Der Stoffspezifische Koeffizient  $\eta$  heißt dynamische Viskosität.

Die mikroskopische Ursache für  $\eta \neq 0$  liegt unter anderem im Teilchenaustausch an der Grenzfläche der einzelnen Flüssigkeitszellen (vgl. Abbildung 54). Man denke insbesondere an ein Gas, bei dem die Teilchen über größere Distanzen frei fliegen und so im Mittel einen gewissen Impuls von einem der gedachten ‘Kästen’ in den anderen Mitnehmen.

Einige Mechanikbücher haben Kapitel zur Hydrodynamik. Es gibt viele Bücher speziell zur Hydrodynamik. Eine knappe Einführung gibt [7] (Buch und Notizen im Web).

# 11 Statistische Mechanik: Kinetik

Jetzt stellen wir die permanente ungeordnete Bewegung der Teilchen (eines Gases) in den Vordergrund unserer Betrachtungen.

## 11.1 Verteilungsfunktion im Phasenraum

Wir betrachten eine sehr große Zahl (zunächst nicht wechselwirkender) Teilchen, eingesperrt im Volumen  $V$ . Die relevante Größenordnung ist die der Avogadro-Konstante:  $N \sim 10^{23}$ . Jedes der Teilchen ist durch seine Lage im Phasenraum, also  $\bar{q}$  und  $\bar{p}$ , charakterisiert.

Wir wollen nun ein kleines Teilvolumen  $\Delta q^3 \cdot \Delta p^3$  im Phasenraum betrachten. Darin seien  $\Delta N$  Teilchen. Es gilt aber immer noch

$$\Delta N \gg 1 \quad \text{obwohl} \quad \Delta q, \Delta p \ll q_{\text{typical}}, p_{\text{typical}}. \quad (11.1)$$

Nach diesen Vorbemerkungen können wir die **Verteilungsfunktion** definieren:

$$f(\bar{q}, \bar{p}, t) = \left( \lim_{\Delta q, \Delta p \rightarrow 0} \right) \frac{\Delta N}{\Delta q^3 \cdot \Delta p^3}. \quad (11.2)$$

Die Anführungsstriche sollen uns daran erinnern, dass dies mathematisch kein Limes ist: Wir *müssen*  $\Delta q^3, \Delta p^3$  groß genug lassen, damit  $\Delta N \gg 1$ . Mit anderen Worten: wir betrachten nur Systeme, in denen  $N$  so groß ist, dass dieser Kompromiss möglich wird.

Die Abhängigkeit von  $\bar{q}$  und  $\bar{p}$  auf der linken Seite entsteht, weil das Volumen  $\Delta q^3 \cdot \Delta p^3$  um die Position  $\bar{q}, \bar{p}$  im Phasenraum zentriert ist. Anschaulich ist diese Verteilungsfunktion  $f$  also schlicht die ‘Teilchen-Dichte’ im Phasenraum.

Es ist offensichtlich, dass

$$N = \int_V d^3\bar{q} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\bar{p} \cdot f(\bar{q}, \bar{p}, t) \quad (11.3)$$

die Gesamtteilchenzahl ist. Diese ist zeitlich konstant. Weiterhin ist

$$n(\bar{q}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\bar{p} \cdot f(\bar{q}, \bar{p}, t) \quad (11.4)$$

die Teilchendichte am Ort  $\bar{q}$ .

Uns interessiert die zeitliche Entwicklung von  $f$ . Dazu erinnern wir uns daran, dass jedes Teilchen der Hamilton-Dynamik unterliegt und diese wiederum dem Satz von Liouville gehorcht. Wir hatten gelernt, dass sich nach diesem Satz die Größe der Teilvolumina beim Strömen nicht ändert (Abb. 55). Da  $f$  der Quotient aus  $\Delta N$  (welches sich per Definition beim Strömen nicht ändert) und  $\Delta V \equiv \Delta q^3 \cdot \Delta p^3$  ist, ändert es sich (entlang der Stromlinien bzw. Phasenraumtrajektorien) ebenfalls nicht:

$$0 = \frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + (\nabla_q f) \cdot \dot{\bar{q}} + (\nabla_p f) \cdot \dot{\bar{p}}. \quad (11.5)$$

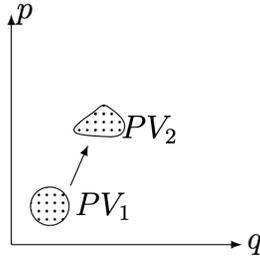


Abbildung 55: Inkompressible Volumina bewegen sich im Phasenraum.

Hier ist  $df/dt$  die Ableitung entlang der Phasenraumtrajektorien, ganz analog zur Materialableitung der Hydrodynamik. Nochmals ganz knapp formuliert: Die Dynamik ist eine inkompressible Strömung im Phasenraum.

Mit Hamilton folgt nun

$$0 = \frac{\partial f}{\partial t} + (\nabla_q f) \cdot \frac{\bar{p}}{m} + (\nabla_p f) \cdot \bar{F}, \quad (11.6)$$

wobei  $\bar{F}$  die äußere Kraft ist, z.B.  $\bar{F} = -m \cdot \bar{g}$ .

In einem entscheidenden neuen Schritt lassen wir nun **Stöße zwischen den Teilchen zu**. Es kommt nunmehr vor, dass ein Teilchen auf dem Weg vom Phasenraumvolumen  $PV_1$  nach  $PV_2$  die (nicht wechselwirkende) Trajektorie verlässt und demzufolge nie in  $PV_2$  ankommt. Man hat dann  $df/dt \neq 0$  und somit

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -(\nabla_q f) \cdot \frac{\bar{p}}{m} - (\nabla_p f) \cdot \bar{F} + \frac{df}{dt}. \quad (11.7)$$

Wir geben den drei Termen auf der rechten Seite nun Namen, welche Ihre physikalische Bedeutung widerspiegeln, und schreiben die obige Gleichung demnach als

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Diffusion}} + \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{äußere Kraft}} + \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Collision}}. \quad (11.8)$$

Die Ausdrücke in (11.8) rechts sind durch die entsprechenden Ausdrücke in (11.7) definiert. In (11.8) haben wir es bereits mit einer sehr allgemeinen Form der **Boltzmann-Gleichung** zu tun.

## 11.2 Boltzmann-Gleichung

Man spricht allerdings meist erst dann von der Boltzmann-Gleichung, wenn man den sogenannten **Kollisionsterm**

$$\frac{df}{dt} = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Collision}} \quad (11.9)$$

spezifiziert hat. Dies wollen wir jetzt tun, wobei wir zwei wichtige Annahmen machen: die **starke Verdünnung** (so dass es nur zu **binären** Stößen kommt) und die Unabhängigkeit der stoßenden Teilchen.

Die zweite Annahme wird auch als **Stoßzahlansatz** (englisch: **molecular chaos**) bezeichnet. Quantitativ bedeutet sie folgendes: Die Zahl der Teilchenpaare am Ort  $\bar{q}$  (im kleinen Volumen  $\Delta q^3$ ) mit zwei jeweils unterschiedlichen Impulsen  $\bar{p}_1$  (im kleinen Volumen  $\Delta p^3$ ) und  $\bar{p}_2$  (in einem anderen kleinen Volumen  $\Delta p^3$ ) ist

$$f(\bar{q}, \bar{p}_1, t) \Delta q^3 \Delta p^3 \cdot f(\bar{q}, \bar{p}_2, t) \Delta q^3 \Delta p^3. \quad (11.10)$$

Entscheidend ist hier, dass wir ein Produkt (und keinerlei kompliziertere Abhängigkeit) annehmen. Die Zahl der für uns interessanten Teilchenpaare ist also proportional zu

$$f(\bar{q}, \bar{p}_1, t) \cdot f(\bar{q}, \bar{p}_2, t). \quad (11.11)$$

Zur Anschauung denke man an harte Kugeln, deren Stöße wir in der Theoretischen Physik I bereits analysiert haben. Aber andere kurzreichweitige Wechselwirkungen sind auch zugelassen.

Jetzt betrachten wir den ersten, oben bereits erwähnten Beitrag zum Kollisionsterm: **Ein Teilchen** (mit Impuls  $\bar{p} = \bar{p}_1$ ) **stößt ein anderes Teilchen** (mit Impuls  $\bar{p}_2$ ) **und verschwindet dadurch aus unserem Volumen**  $\Delta q^3 \Delta p^3$ . Dies wollen wir wie folgt quantifizieren:

$$\left(\frac{df}{dt}\right)^{(a)}(\bar{q}, \bar{p}_1, t) = - \int d^3\bar{p}_2 d^3\bar{p}'_1 d^3\bar{p}'_2 \tilde{\tau}(\bar{p}_1, \bar{p}_2, \bar{p}'_1, \bar{p}'_2) \cdot f(\bar{q}, \bar{p}_1, t) \cdot f(\bar{q}, \bar{p}_2, t). \quad (11.12)$$

In diesem Ausdruck integrieren wir über den Impuls  $p_2$  des Partners sowie über die Impulse  $p'_{1,2}$  der Endprodukte. Das Minuszeichen steht für das Verschwinden. Die Funktion  $\tilde{\tau}$  spezifiziert, wie oft die Kollision von Teilchen mit  $\bar{p}_1, \bar{p}_2$  zu Teilchen mit Impulsen  $\bar{p}'_1, \bar{p}'_2$  führt. Dieser Ausdruck hängt von den Details der Dynamik ab – er spezifiziert, was im Zentrum von Abb. 56 wirklich passiert. Man spricht hier vom **Collision Kernel** oder **Integrationskern**  $\tau$ , der sich allerdings noch geringfügig von unserem  $\tilde{\tau}$  unterscheidet.

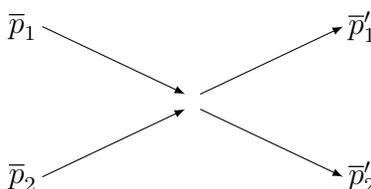


Abbildung 56: Teilchenkollision.

### 11.3 Die Delta-Funktion (M)

Um diesen Unterschied zwischen  $\tau$  und  $\tilde{\tau}$  konkretisieren zu können, brauchen wir zumindest eine sehr grobe Vorstellung von der sogenannten  **$\delta$ -Funktion**:

Sei dazu die Funktion  $\delta_\epsilon(x)$  durch Abb. 57 definiert. Diese ist speziell so gebaut, dass

$$\int \delta_\epsilon(x) dx = 1 \quad \text{und} \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta_\epsilon(x) = 0, \quad \forall x \neq 0. \quad (11.13)$$

Die spezielle ‘Kastenform’ haben wir zwecks einfacherer Rechnung gewählt – sie ist unwesentlich. Wir hätten z.B. ebenso eine entsprechend normierte Gaußkurve wählen können, vgl. Abb. 58.

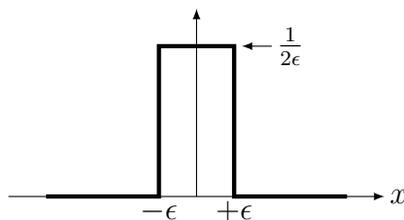


Abbildung 57: Zur  $\delta$ -Funktion.

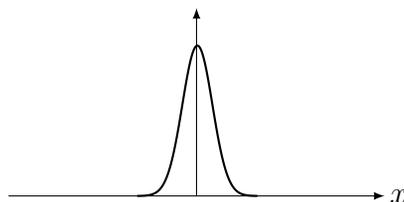


Abbildung 58: Alternative Grenzwertdefinition der  $\delta$ -Funktion, mit Gaußfunktion.

Eine (wirklich sehr grobe!) Definition der  $\delta$ -Funktion ist nun

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta_\epsilon(x), \quad (11.14)$$

mit einem der obigen  $\delta_\epsilon$ 's.

Etwas besser ist es, zu sagen, dass  $\delta(x)$  durch die beiden Bedingungen

$$\int \delta(x) dx = 1 \quad \text{und} \quad \delta(x) = 0, \quad \forall x \neq 0 \quad (11.15)$$

definiert ist, wobei man nur Ausdrücke mit  $\delta(x)$  zulässt, die aufgrund dieser beiden Bedingungen eindeutig auswertbar sind.

Noch besser ist es, sich  $\delta$  als Funktional vorzustellen,

$$f \mapsto \int f(x) \delta(x) dx = f(0), \quad (11.16)$$

wobei das Integral rechts nur eine bequeme Schreibweise ist - der eigentliche Gehalt ist die Zuordnung  $f \rightarrow f(0)$ .

Wir wollen es dabei bewenden lassen und uns darauf einigen, dass  $\delta(x)$  eine Funktion ist, die ‘ganz scharf’ bei 0 lokalisiert und auf 1 normiert ist. Klarerweise ist dann  $\delta(x - x_0)$  entsprechend scharf bei  $x_0$  lokalisiert und es gilt:

$$\int f(x) \delta(x - x_0) dx = f(x_0). \quad (11.17)$$

Weiterhin benutzen wir die Schreibweise

$$\delta^3(\vec{x}) = \delta(x^1) \cdot \delta(x^2) \cdot \delta(x^3), \quad (11.18)$$

wenn wir z.B. mir drei Variablen gleichzeitig arbeiten.

## Boltzmann-Gleichung (Fortsetzung)

Jetzt können wir die beim elastischen Stoß stets geltende Energie- und Impulserhaltung durch

$$\delta^4(P_f - P_i) \equiv \delta(E_f - E_i) \delta^3(\vec{p}_f - \vec{p}_i) \quad (11.19)$$

erzwingen, wobei

$$\vec{p}_i \equiv \vec{p}_1 + \vec{p}_2, \quad \vec{p}_f \equiv \vec{p}'_1 + \vec{p}'_2 \quad (11.20)$$

und

$$E_i \equiv E_1 + E_2 = \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m}, \quad E_f \equiv E'_1 + E'_2 = \frac{\vec{p}'_1{}^2}{2m} + \frac{\vec{p}'_2{}^2}{2m}, \quad (11.21)$$

und die Indizes  $i/f$  für ‘initial’ und ‘final’ stehen.

Für ‘Teil a’ des Stoßterms können wir nun

$$\left(\frac{df}{dt}\right)^{(a)}(\vec{q}, \vec{p}_1, t) = - \int d^3\vec{p}_2 d^3\vec{p}'_1 d^3\vec{p}'_2 \delta^4(P_f - P_i) \cdot \tau(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}'_1, \vec{p}'_2) \cdot f(\vec{q}, \vec{p}_1, t) f(\vec{q}, \vec{p}_2, t) \quad (11.22)$$

schreiben. Dabei haben wir von der sehr wichtigen dynamischen Größe  $\tau$ , dem Integrationskern oder **Collision Kernel**, den prozessunabhängigen Energie- und Impulserhaltungs-Constraint in Form der  $\delta^4$ -Funktion abgetrennt.

Es ist jetzt offensichtlich, wie ‘Teil b’ aussieht, welcher die Streuung eines ‘fremden’ Teilchens in ‘unser’ Phasenraumvolumen  $\Delta q^3 \Delta p^3$  beschreibt:

$$\left(\frac{df}{dt}\right)^{(b)}(\vec{q}, \vec{p}_1, t) = + \int d^3\vec{p}_2 d^3\vec{p}'_1 d^3\vec{p}'_2 \delta^4(P_f - P_i) \cdot \tau(\vec{p}'_1, \vec{p}'_2, \vec{p}_1, \vec{p}_2) \cdot f(\vec{q}, \vec{p}'_1, t) f(\vec{q}, \vec{p}'_2, t). \quad (11.23)$$

Die relevanten Wahrscheinlichkeiten sind jetzt durch die Phasenraum-Dichten bei Impulsen  $p'_1$  und  $p'_2$  gegeben und der dynamische Prozess ist schlicht die Umkehrung des Prozesses in Abb. 56.

In sehr vielen Fällen ist die Dynamik im Allgemeinen und die Streudynamik im Besonderen **zeitumkehrinvariant** ist, und zwar sowohl klassisch als auch quantenmechanisch:

$$\tau(\vec{p}'_1, \vec{p}'_2, \vec{p}_1, \vec{p}_2) = \tau(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}'_1, \vec{p}'_2). \quad (11.24)$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Coll.} &= \int d^3\vec{p}_2 d^3\vec{p}'_1 d^3\vec{p}'_2 \cdot \delta^4(P_f - P_i) \cdot \tau(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}'_1, \vec{p}'_2) \\ &\quad \times (f(\vec{q}, \vec{p}'_1, t) f(\vec{q}, \vec{p}'_2, t) - f(\vec{q}, \vec{p}_1, t) f(\vec{q}, \vec{p}_2, t)). \end{aligned} \quad (11.25)$$

Eingesetzt in (11.8) liefert dies die allgemeine Formulierung der Boltzmann-Gleichung.

Man kann nun (mit einiger rechnerischen Mühe aber ohne neue Ideen) den Integrationskern durch den Wirkungsquerschnitt ausdrücken. Wir geben das Resultat ohne Beweis an,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Coll.} = \int d^3\bar{p}_2 \int d\Omega |\bar{v}_1 - \bar{v}_2| \frac{d\sigma}{d\Omega}(\bar{p}_1, \bar{p}_2, \Omega) (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) \quad (11.26)$$

wobei  $d\Omega$  die Integration über die Richtung der Streuprodukte im Schwerpunktsystem bezeichnet und wir für die relevante Kombination der Verteilungsfunktionen eine hoffentlich selbsterklärende Kurzform gewählt haben. Mehr Details finden sich z.B. in [8].

Die Boltzmann-Gleichung ist also (11.8) mit (11.26).

## 11.4 Die Maxwell-Boltzmann-Verteilung

Zur Vereinfachung sei nun die äußere Kraft Null,  $\bar{F} = 0$ , und die Dichte im Konfigurationsraum homogen,  $f(\bar{q}, \bar{p}, t) = f(\bar{p}, t)$ . Es folgt

$$\frac{\partial f(\bar{p}_1, t)}{\partial t} = \int_{\bar{p}_2, \bar{p}'_1, \bar{p}'_2} \delta^4(P_f - P_i) \cdot \tau \cdot (f'_1 f'_2 - f_1 f_2). \quad (11.27)$$

Wir sehen, dass die Bedingung

$$f_1 f_2 = f'_1 f'_2 \quad (11.28)$$

**hinreichend** für das Vorliegen von **Gleichgewicht** (also Zeitunabhängigkeit von  $f$ ) ist.

Die **Notwendigkeit** dieser Bedingung folgt aus **Boltzmanns  $H$ -Theorem**. Dazu definiert man das Funktional

$$H[f] \equiv \int d^3\bar{p} \cdot f(\bar{p}) \cdot \ln(f(\bar{p})).$$

Wenn nun sich nun  $f$  zeitlich gemäß (11.27) entwickelt, so kann man zeigen, dass

$$\frac{dH}{dt} \leq 0 \quad (11.29)$$

und sogar

$$\frac{dH}{dt} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad f'_1 f'_2 = f_1 f_2. \quad (11.30)$$

Die Herleitung, welche im wesentlichen nur aus algebraischen Manipulationen besteht, findet sich z.B. in [8, 9].  $H$  ist eng mit der Entropie und das  $H$ -Theorem mit dem 2. Hauptsatz der Thermodynamik verbunden. Für uns impliziert es vor allem, dass die Bedingung  $f'_1 f'_2 - f_1 f_2 = 0$  notwendig für das Vorliegen von Gleichgewicht ist.

Eine äquivalente Schreibweise der Gleichgewichtsbedingung ist

$$\ln f(\bar{p}_1) + \ln f(\bar{p}_2) = \ln f(\bar{p}'_1) + \ln f(\bar{p}'_2). \quad (11.31)$$

Dies hat die Form eines Erhaltungssatzes für  $2 \rightarrow 2$ -Prozesse (man denke zum Beispiel an  $E_1 + E_2 = E'_1 + E'_2$ ). Wenn wir also eine Erhaltungsgröße  $\chi(\bar{p})$  kennen und  $f$  durch

$$\ln f(\bar{p}) \equiv \text{const.} \times \chi(\bar{p}) \quad (11.32)$$

definieren, erhalten wir stets eine Gleichgewichtsverteilung.

Der allgemeine Ansatz für  $f$  ist also

$$\ln f(\bar{p}) = \sum_i c_i \chi_i(\bar{p}), \quad (11.33)$$

wobei  $\chi_i$  über alle Erhaltungsgrößen läuft. Im allgemeinen Fall erhalten sind nur:  $1$ ,  $\bar{p}$  (also  $p_1, p_2, p_3$ ) und  $E = \bar{p}^2/2m$ . (Den Drehimpuls können wir nicht zulassen, weil dieser  $\bar{q}$  involviert.) Wir haben also

$$\ln f = a + b \cdot p_1 + c \cdot p_2 + d \cdot p_3 + e \cdot \frac{\bar{p}^2}{2m}, \quad (11.34)$$

mit fünf frei wählbaren Konstanten  $a, \dots, e$ . Man kann dies umschreiben als

$$\ln f = -A(\bar{p} - \bar{p}_0)^2 + \ln C, \quad (11.35)$$

was immer noch die allgemeinste Linearkombination von  $1$ ,  $\{p_i\}$  und  $E$  ist. Es folgt

$$f(\bar{p}) = C \cdot e^{-A(\bar{p} - \bar{p}_0)^2}. \quad (11.36)$$

In dieser Form lässt sich die physikalische Bedeutung der einzelnen Koeffizienten bequem diskutieren. Wir stellen dazu zunächst fest, dass  $\bar{p}_0$  den **Mittelwert des Impulses** beschreibt. (Klarerweise muss in einem festen Kasten demnach immer  $\bar{p}_0 = 0$  gelten.) Bevor wir weitermachen, ein paar allgemeine Bemerkungen zum

## 11.5 Mittelwert (M)

Wenn wir eine Größe  $N$  Mal messen können (z.B. das Gewicht von  $N$  Personen), so ist es nützlich den Mittelwert

$$\langle F \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N F(i) = \left( \sum_{i=1}^N F(i) \right) / \left( \sum_{i=1}^N 1 \right) \quad (11.37)$$

zu definieren.

Dies überträgt sich sofort auf unseren Fall des verdünnten Gases mit Verteilungsfunktion  $f(q, p)$  im Phasenraum. Dazu betrachten wir eine Größe  $F = F(\bar{q}, \bar{p})$  und definieren

$$\langle F \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N F(\bar{q}_i, \bar{p}_i). \quad (11.38)$$

Da nun alle Teilchen in einem kleinen Teilvolumen  $\alpha$  mit hinreichender Genauigkeit das gleiche  $\bar{q}_i$  und  $\bar{p}_i$  haben, können wir diese durch  $\bar{q}_\alpha$  und  $\bar{p}_\alpha$  annähern und schreiben

$$\langle F \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\alpha} F(\bar{q}_\alpha, \bar{p}_\alpha) N_{\alpha} = \frac{1}{N} \sum_{\alpha} F(\bar{q}_\alpha, \bar{p}_\alpha) \{ f(\bar{q}_\alpha, \bar{p}_\alpha) \cdot (\Delta q^3 \Delta p^3)_{\alpha} \}. \quad (11.39)$$

Der Ausdruck in der geschweiften Klammer ist hierbei schlicht die Zahl  $N_{\alpha}$  der Teilchen im Teilvolumen  $\alpha$  und die Summe läuft über alle Teilvolumina. Im Grenzwert kleiner Teilvolumina gilt

$$\langle F \rangle = \frac{1}{N} \int d^3\bar{p} d^3\bar{q} f(\bar{q}, \bar{p}) F(\bar{q}, \bar{p}) = \frac{\int d^3\bar{p} d^3\bar{q} f(\bar{q}, \bar{p}) F(\bar{q}, \bar{p})}{\int d^3\bar{p} d^3\bar{q} f(\bar{q}, \bar{p})}. \quad (11.40)$$

Falls nun z.B.  $f$  und  $F$  nicht von  $\bar{q}$  abhängen, erhalten wir

$$\langle F \rangle = \frac{V \int d^3\bar{p} f(\bar{p}) F(\bar{p})}{V \int d^3\bar{p} f(\bar{p})} = \frac{\int d^3\bar{p} f(\bar{p}) F(\bar{p})}{\int d^3\bar{p} f(\bar{p})}, \quad (11.41)$$

wobei sich das Volumen gekürzt hat.

## Die Maxwell-Boltzmann-Verteilung (Fortsetzung)

Jetzt können wir unsere Behauptung bezüglich der physikalischen Bedeutung von  $\bar{p}_0$  also mathematisch präzise formulieren: Wir wählen die drei Observablen  $\{F^1, F^2, F^3\} \equiv \bar{F} \equiv \bar{p}$  und behaupten, dass  $\langle \bar{F} \rangle = \bar{p}_0$  gilt. Das sind natürlich drei unabhängige Aussagen in einer, aber es ist auch klar, dass es reicht, z.B. nur den Fall der ersten Komponente zu prüfen. Wir müssen also

$$\langle p_1 \rangle = \left( \int d^3\bar{p} p^1 C e^{-A(\bar{p}-\bar{p}_0)^2} \right) / \left( \int d^3\bar{p} C e^{-A(\bar{p}-\bar{p}_0)^2} \right) \quad (11.42)$$

berechnen. Das Ergebnis ist in der Tat  $(p_0)^1$ , siehe Übungen. Zur Durchführung sei hier nur gesagt, dass es ausreicht, das  $d^3\bar{p}$ -Integral als Produkt von drei Integrationen über die reelle Achse aufzufassen und die Exponentialfunktion entsprechend zu faktorisieren.

Wir können nun o.B.d.A. durch einen Boost in das Ruhesystem des Gases gehen und somit  $\bar{p}_0 = 0$  betrachten. Jetzt berechnen wir den Erwartungswert  $\varepsilon$  der Observablen  $F(\bar{p}) = \bar{p}^2/(2m)$  mittels einfacher Integration und finden

$$\varepsilon \equiv \left\langle \frac{\bar{p}^2}{2m} \right\rangle = \frac{3}{4Am}. \quad (11.43)$$

Wir definieren die Temperatur durch  $T$  durch

$$\frac{1}{2}kT \equiv \frac{\varepsilon}{n_f} = \frac{1}{4Am}, \quad (11.44)$$

wobei  $n_f$  die Zahl der Freiheitsgrade des einzelnen Teilchens ist, hier  $n_f = 3$ . Damit folgt

$$A = \frac{1}{2m \cdot kT}. \quad (11.45)$$

Dies ist im Rahmen des Theorie-Programms nur die erste nicht aber die einzige Definition der Temperatur. Die Konstante  $k = k_B$  ist Konvention. Die ‘natürliche’ Einheit der Temperatur  $T$  ist, wie man aus dem Obigen sieht, die der Energie.

Soweit haben wir also

$$f(\bar{p}) = C e^{-A\bar{p}^2} = C e^{-(\bar{p}^2/2m)/kT} = C e^{-E(\bar{p})/kT} \quad (11.46)$$

gefunden.  $C$  ist durch

$$N = \int d^3\bar{q} d^3\bar{p} \cdot f(\bar{p}) = V \int d^3\bar{p} \cdot f(\bar{p}) \quad (11.47)$$

bzw.

$$n \equiv \frac{N}{V} = \int d^3\bar{p} \cdot f(\bar{p}) \quad (11.48)$$

bestimmt. Es folgt schließlich

$$f(\bar{p}) = \frac{n}{(2\pi m \cdot kT)^{3/2}} \cdot e^{-E(\bar{p})/kT} . \quad (11.49)$$

## 11.6 Maxwell-Boltzmann mit konservativen äußeren Kräften

Wir können leicht eine konservative äußerere Kraft,

$$\bar{F}(\bar{q}) = -\bar{\nabla}_q V(\bar{q}) , \quad (11.50)$$

zulassen. Dann gilt

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = -\frac{\bar{p}_1}{m} \cdot \bar{\nabla}_q f_1 - \bar{F} \cdot \bar{\nabla}_p f_1 + \int \delta^4(\dots) \tau (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) , \quad (11.51)$$

mit der nun schon vertrauten Kurz-Notation  $f'_1 = f(\bar{p}'_1, \bar{q}_1) \equiv f(\bar{p}'_1, \bar{q})$  etc. Man überlegt sich leicht, dass der Kollisions-Term nach wie vor verschwindet. Dies liegt an unserer stillschweigend gemachten Annahme, dass die Kollision  $\bar{q}$  nicht beeinflusst:  $\bar{q}_1 = \bar{q}_2 = \bar{q}'_1 = \bar{q}'_2 = \bar{q}$ . Physikalisch bedeutet dies, dass die ‘mittlere freie Weglänge’ als klein gegen die typische Längenskala des Potentials angenommen wird.

Nun hatten wir aber aus dem Verschwinden des Kollisionsterms bereits die kraftfreie Maxwell-Boltzmann-Verteilung (11.46) hergeleitet. Wir erwarten also, dass die Impulsabhängigkeit immer noch dieser Verteilung gehorcht. Nach Umbenennung  $\bar{p}_1 \rightarrow \bar{p}$  machen wir also den Ansatz

$$f(\bar{p}, \bar{q}) = f_0(\bar{p}) \cdot g(\bar{q}) . \quad (11.52)$$

Dabei ist

$$f_0(\bar{p}) = C_0 e^{-\bar{p}^2/(2mkT)} \quad (11.53)$$

die eben diskutierte kraftfreie Verteilung in  $\bar{p}$ . Damit lautet die Gleichgewichtsforderung

$$0 = -\frac{\bar{p}}{m} \cdot \bar{\nabla}_q (f_0(\bar{p})g(\bar{q})) + (\bar{\nabla}_q V(\bar{q})) \cdot \bar{\nabla}_p (f_0(\bar{p})g(\bar{q})) . \quad (11.54)$$

Eine kurze Nebenrechnung zeigt, dass

$$\bar{\nabla}_p f_0(\bar{p}) = -\frac{\bar{p}}{mkT} f_0(\bar{p}). \quad (11.55)$$

Damit folgt

$$0 = -\frac{\bar{p}}{m} \cdot (\bar{\nabla}_q g(\bar{q})) f_0(\bar{p}) - f_0(\bar{p}) g(\bar{q}) \frac{\bar{p}}{mkT} \cdot \bar{\nabla}_q V(\bar{q}). \quad (11.56)$$

Diese Gleichung wird auf alle Fälle erfüllt sein, wenn die entsprechende Beziehung auch ohne den gemeinsamen Faktor  $(\bar{p}/m)f_0(\bar{p})$  gilt (wir behaupten nicht, dass dies notwendig ist):

$$0 = -\bar{\nabla}_q g(\bar{q}) - g(\bar{q}) \frac{\bar{\nabla}_q V(\bar{q})}{kT}. \quad (11.57)$$

Dies kann man umschreiben als

$$\frac{\bar{\nabla} g}{g} = -\frac{\bar{\nabla} V}{kT} \quad \text{bzw.} \quad \bar{\nabla}(\ln g) = -\bar{\nabla} \frac{V}{kT}. \quad (11.58)$$

Eine Lösung ist

$$g = \text{const.} e^{-V/kT}. \quad (11.59)$$

Damit ergibt sich die Maxwell-Boltzmann-Verteilung

$$f(\bar{p}, \bar{q}) = C \cdot e^{-E(\bar{q}, \bar{p})/kT} \quad \text{mit} \quad E(\bar{q}, \bar{p}) = \frac{\bar{p}^2}{2m} + V(\bar{q}). \quad (11.60)$$

Die Konstante  $C$  ist jetzt durch

$$N = \int_{Vol} d^3\bar{q} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\bar{p} f \quad (11.61)$$

bestimmt.

## 11.7 Diffusion

Betrachten wir eine in einem Gas bei  $y_0$  stehende, kleine Fläche  $\Delta A$ , welche parallel zur  $x$ - $z$ -Ebene orientiert ist (Abb. 59). Eine grobe Schätzung der Zahl von Teilchen, die von links kommen und die Fläche in der Zeit  $\Delta t$  passieren ist

$$N_L \sim \frac{1}{6} \underbrace{n(x, y_0 - \Delta y, z)}_{\text{relevante Dichte}} \cdot \underbrace{\Delta A \Delta y}_{\text{relev. Volumen}} \quad (11.62)$$

Der Faktor  $\frac{1}{6}$  ist hier ein (sehr grober) Faktor für die ‘richtige’ Bewegungsrichtung. Die Größe  $n(\bar{x})$  bezeichnet die Teilchendichte (Teilchenzahl pro Volumen). Außerdem ist  $\Delta A \cdot \Delta y$  das Volumen eines Quaders links von der Fläche, so dass  $(1/6)$  der darin befindlichen Teilchen in der Zeit  $\Delta t$  die relevante Fläche passieren werden. Klarerweise machen dieses Bild und diese Abschätzung nur Sinn, wenn  $v \equiv \langle |\bar{v}| \rangle \sim \Delta y / \Delta t$  gilt. Das Symbol  $\sim$  bedeutet für uns im Moment, dass wir uns Fehler bei numerischen Multiplikative Faktoren  $\mathcal{O}(1)$  erlauben.

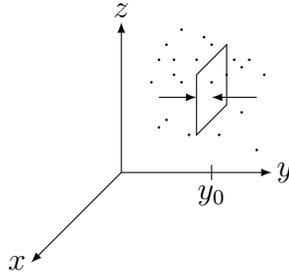


Abbildung 59: Teilchen im Raum, Fläche  $\Delta A$ .

Aus dem oben gesagten folgt nun sofort die  $y$ -Komponente der **Stromdichte**:

$$j_y \sim \frac{N_L - N_R}{\Delta A \Delta t} \sim \frac{1}{6} \frac{\Delta y}{\Delta t} \cdot \left( n(y_0 - \Delta y) - n(y_0 + \Delta y) \right) \sim \frac{v}{6} \left( \frac{\partial n}{\partial y} \right) (-2\Delta y). \quad (11.63)$$

Wir haben hier die Taylorentwicklungs-Formel in führender Ordnung in  $\Delta y$  benutzt.

Die naive Erwartung wäre, dass wir den Limes  $\Delta y \rightarrow 0$  (und damit  $\Delta t \rightarrow 0$ ) nehmen und ein endliches Ergebnis finden. Aber das tritt nicht ein – unser Ergebnis verschwindet in diesem Limes. Wir müssen uns also überlegen, für welche Quadergrößen (vgl. Abb. 60) unser einfaches Modell sinnvoll ist.

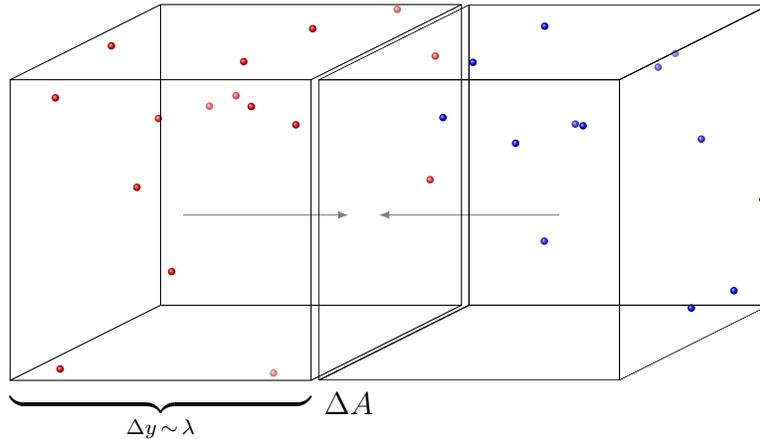


Abbildung 60: Bewegte Teilchen im Raum.

Dazu müssen wir beachten, dass die Teilchen stoßen und es eine **mittlere freie Weglänge**  $\lambda$  gibt. Falls wir  $\Delta y \gg \lambda$  wählen, ist unser Bild offensichtlich falsch, weil die Teilchen über so große Entfernungen nicht frei fliegen. Falls wir  $\Delta y \sim \lambda$  wählen, haben wir eine Chance, dass unser Bild bis auf  $\mathcal{O}(1)$  Faktoren stimmt. Falls wir  $\Delta y \ll \lambda$  wählen, stimmt die Annahme des freien Flugs sicher, aber wir machen einen Fehler indem wir die bevorzugte Anfangsflugrichtung ignorieren. Wir bekommen aufgrund des  $n$ -Gradienten also zwar eine gewisse Stromdichte, aber diese unterschätzt das wahre Resultat.

Also ist  $\Delta y \sim \lambda$  das Beste, was wir auf diesem Präzisionslevel tun können. Wir haben

$$j_y \sim -\frac{v\lambda}{3} \frac{\partial n}{\partial y} \quad (11.64)$$

und analoge Beziehungen für  $j_x$  und  $j_z$ . Zusammengefasst gilt

$$\bar{j} = -D\bar{\nabla}n \quad \text{mit der Diffusionskonstanten} \quad D \sim v\lambda/3. \quad (11.65)$$

Da Teilchen nicht verloren gehen, gilt die Kontinuitätsgleichung (die Herleitung geschieht mittels des Gaußschen Satzes)

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\bar{\nabla} \cdot \bar{j}. \quad (11.66)$$

Dies ist völlig analog zur entsprechenden Gleichung in der Hydrodynamik. Die Entsprechung lautet  $n \rightarrow \rho$ ,  $\bar{j} \rightarrow \rho\bar{v}$ .

Wenn wir in die Kontinuitätsgleichung den oben ‘hergeleiteten’ Ausdruck für  $\bar{j}$  einsetzen, ergibt sich die **Diffusionsgleichung**:

$$\frac{\partial n(\bar{x}, t)}{\partial t} = D\Delta n(\bar{x}, t), \quad \text{mit} \quad \Delta = \sum_{i=1}^3 \left( \frac{\partial}{\partial x^i} \right)^2. \quad (11.67)$$

Dies ist eine partielle Differentialgleichung. Eine schöne und anschauliche Lösung dazu ist

$$n(\bar{x}, t) = \frac{N}{(4\pi \cdot Dt)^{3/2}} \cdot e^{-\bar{x}^2/(4Dt)}. \quad (11.68)$$

Sie beschreibt eine ‘breitlaufende’ 3-dimensionale Gaußkurve, Abb. 61.

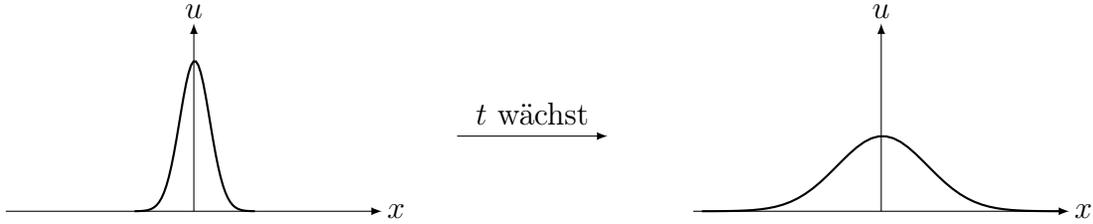


Abbildung 61: Breitlaufende 3-dimensionale Gaußkurve.

Das Obige ersetzt natürlich nicht eine (im Prinzip mögliche aber für uns hier zu aufwendige) ordentliche Herleitung der Diffusion aus der Boltzmann-Gleichung. Wir wollen aber wenigstens prüfen, dass der früher besprochene ‘Diffusionsterm’ der Boltzmann-Gleichung ‘in etwas das Richtige tut’. Dazu schreiben wir die Boltzmann-Gleichung für  $\bar{F} = 0$  und  $(\partial f/\partial t)_{\text{Collision}} = 0$  hin und erinnern auch an den Zusammenhang von  $f$  und  $n$ :

$$\frac{\partial f}{\partial t} \sim -\frac{\bar{p}}{m} \cdot \bar{\nabla}_q f, \quad n(\bar{q}) = \int d^3\bar{p} f(\bar{q}, \bar{p}). \quad (11.69)$$

Jetzt integrieren wir beide Seiten über  $d^3\bar{p}$  und finden

$$\frac{\partial n(\bar{q})}{\partial t} \sim -\bar{\nabla}_q \cdot \int d^3\bar{p} f(\bar{p}, \bar{q}) \frac{\bar{p}}{m} \sim -\bar{\nabla}_q \cdot (\langle \bar{v} \rangle n) = \bar{\nabla}_q \cdot \bar{j}. \quad (11.70)$$

In der Tat, die Kontinuitätsgleichung als zentraler Teilbestandteil der Diffusionsgleichung ist hier also enthalten.

## 12 Statistische Mechanik: Thermodynamische Gesamtheiten

Im Englischen spricht man von ‘Statistical Ensembles’.

### 12.1 Der $\Gamma$ -Raum

Bisher haben wir unser (nur schwach wechselwirkendes, verdünntes) Gas durch die Verteilungsfunktion  $f(\bar{q}, \bar{p})$  im 1-Teilchen Phasenraum (dem sogenannten  $\mu$ -Raum) beschrieben. Jetzt wechseln wir zum  $N$ -Teilchen-Phasenraum (dem  $\Gamma$ -Raum). Dieser Raum ist  $6N$ -dimensional mit Koordinaten  $\bar{q}_1, \dots, \bar{q}_N, \bar{p}_1, \dots, \bar{p}_N$ . Ein bestimmter Zustand unseres gesamten Gases entspricht nur einem einzigen Punkt im  $\Gamma$ -Raum. Zum Vergleich: Im  $\mu$ -Raum haben wir  $N$  Punkte in 6 Dimensionen; im  $\Gamma$ -Raum einen Punkt in  $6N$  Dimensionen.

Wir erinnern uns, dass typischerweise  $N \sim 10^{23}$  und die Dynamik im  $\Gamma$ -Raum nun die freie Bewegung und die Stöße all dieser  $\sim 10^{23}$  Teilchen einschließt. Eine explizite Kenntnis des relevanten Punktes im  $\Gamma$ -Raum und dessen Bewegung ist demnach aussichtslos.

Uns interessiert eine solche **mikroskopische** Beschreibung eigentlich auch nicht. Vielmehr interessiert uns der **makroskopische** Zustand eines Systems mit vielen Freiheitsgraden. (Wir denken dabei weiter primär an unser Gas in einem Kasten, aber andere Systeme, zum Beispiel Festkörper, sind auch so beschreibbar.) Wir verstehen unter dem makroskopischen Zustand die **Gesamtheit aller Mikrozustände** (aller Punkte im Phasenraum), welche für uns (als einem in Präzision und Datenmenge eingeschränkten Beobachter) zu diesem makroskopischen Zustand gehören. Unser Wissen ist (und bleibt) also unvollständig – viele Mikrozustände sind möglich. Dies zwingt uns zur Beschäftigung mit der

### 12.2 Wahrscheinlichkeit (M)

Wir brauchen zunächst einige Begriffe. Der erste ist der des **Ereignisraums**, definiert als die Menge aller Elementarereignisse. Um ein Beispiel zu geben, betrachten wir einen 2-fachen Münzwurf. Der Ereignisraum ist dann  $M = \{WW, WZ, ZW, ZZ\}$ , mit  $W$  für Wappen und  $Z$  für Zahl.

Ein **Ereignis** definieren wir als eine Untermenge des Ereignisraumes. Beispiele sind:

- (1) Zweimal das gleiche Resultat:  $A = \{WW, ZZ\}$ .
- (2) Zweimal Wappen:  $A = \{WW\}$ .
- (3) Das ‘unmögliche Ereignis’:  $A = \emptyset$ .

Nun kommen wir zum zentralen Begriff der Wahrscheinlichkeit. Anschaulich sagt die Wahrscheinlichkeit etwas über unsere Erwartung bezüglich des Ausgangs eines Experimentes (des Eintreten eines Ereignisses) aus. Etwas genauer könnte man die relative Häufigkeit eines

Ereignisses bei vielfacher Wiederholung ('limiting frequency') definieren:

$$P(\{WW, ZZ\}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{(\# \text{ der Ausgänge } WW \text{ oder } ZZ)}{(\# \text{ der Doppelmünzwürfe}) \equiv N} . \quad (12.1)$$

Hier steht das 'Hash' oder 'Number Sign' für 'Zahl'.

Jetzt geben wir eine formale Definition: Die **Wahrscheinlichkeit** ist eine reelle Funktion auf dem Ereignisraum (Raum aller  $A$ 's),

$$P : A \mapsto P(A) \in \mathbb{R} , \quad (12.2)$$

welche die **Kolmogorov-Axiome** erfüllt:

(I)  $P(A) \geq 0 \forall A$

(II)  $P(M) = 1$

(III) Seien  $\{A_i, i \in I\}$  paarweise disjunkte Ereignisse (das heißt, dass  $A_i \cap A_j = \emptyset$  falls  $i \neq j$ ). Hierbei ist  $I$  eine endliche oder abzählbaren Indexmenge. Dann gilt:

$$P\left(\bigcup_{i \in I} A_i\right) = \sum_{i \in I} P(A_i) . \quad (12.3)$$

Typische Aufgaben der Wahrscheinlichkeitsrechnung basieren auf der Ausnutzung dieser Axiome und Symmetrien (also Vorgaben bzgl.  $P$ , z.B. der Benutzung einer 'fairen Münze' etc.).

### 12.3 Maß und Wahrscheinlichkeitsraum (M)

Um eine manchmal relevante Verfeinerung des Wahrscheinlichkeitsbegriffs zu geben, definieren wir zunächst den auch sonst wichtigen Begriff des Maßes:

Sei  $M$  eine nichtleere Menge. Eine Familie  $\mathcal{A}$  von Untermengen von  $M$  heißt  **$\sigma$ -Algebra**, falls

(I)  $M \in \mathcal{A}$

(II) Für jedes  $A \subset M$  gilt:  $A \in \mathcal{A} \Rightarrow M \setminus A \in \mathcal{A}$  .

(III) Für jede Folge  $\{A_i\}$  mit  $i \in \mathbb{N}$ ,  $A_i \in \mathcal{A}$  gilt:  $\bigcup_{i \in \mathbb{N}} A_i \in \mathcal{A}$  .

Des Weiteren heißt eine Abbildung  $\mu : \mathcal{A} \rightarrow [0, \infty]$  **Maß**, falls

(I)  $\mu(\emptyset) = 0$

(II)  $\mu\left(\bigcup_{i \in \mathbb{N}} A_i\right) = \sum_{i \in \mathbb{N}} \mu(A_i)$  für jede Folge disjunkter Elemente  $A_i$  aus  $\mathcal{A}$  .

Schließlich der für uns hier relevante Begriff: Falls  $\mu(M) = 1$ , heißt das Tripel  $(M, \mathcal{A}, \mu)$  ein **Wahrscheinlichkeitsraum**.

Der entscheidende neue Punkt ist, dass man mit diesem Begriff auch Situationen beschreiben kann, in denen **nicht alle** Teilmengen von  $M$  als Ereignisse zugelassen sind.

## Der $\Gamma$ -Raum (Fortsetzung)

Uns wird meist der kontinuierliche Fall, also z.B.  $M = \mathbb{R}$ , interessieren. In solchen Situationen wird die Wahrscheinlichkeit oft durch eine **Wahrscheinlichkeitsdichte**  $p(x)$  angegeben:

$$P([x_1, x_2]) = \int_{x_1}^{x_2} dx p(x). \quad (12.4)$$

Analog hat man z.B. für  $M = \Gamma = \mathbb{R}^{6N}$ :

$$P(O) = \int_O d^{6N}\bar{\xi} p(\bar{\xi}) \quad (12.5)$$

wobei  $O$  ein Gebiet in  $\mathbb{R}^{6N}$  ist und  $\bar{\xi} \in \mathbb{R}^{6N}$ .

## 12.4 Das mikrokanonische Ensemble

Nach den obigen Vorbereitungen kommen wir nun zu den verschiedenen thermodynamischen Gesamtheiten oder Ensembles. Das vielleicht einfachste ist das mikrokanonische Ensemble. Es stellt die Gesamtheit aller Mikrozustände (mit entsprechenden Wahrscheinlichkeiten) dar, welche zu dem makroskopischen Zustand eines Systems mit **konstanter Gesamtenergie** gehören:  $E = E_{tot} = \text{const.}$  Für unser Standard-Beispielsystem ‘Gas im Kasten’ bedeutet dies, dass die Wände elastisch reflektieren.

Wir machen nun zusätzlich die entscheidende **Gleichwahrscheinlichkeitsannahme**: Jede Phasenraumzelle in  $\Gamma$  ist gleich wahrscheinlich. (Wobei wir natürlich immer  $E = E_{tot} = \text{const.}$  respektieren – nur solche Phasenraumzellen sind erlaubt.)

Zur Gleichwahrscheinlichkeitsannahme, deren Motivation und physikalischen Bedeutung ließe sich viel sagen. Stichworte in der Literatur sind: Poincaré-Rekurrenztheorem, Quasi-Ergodenhypothese, Gleichheit von Zeit und Ensemblemittel (vgl. [8]). Wir lassen es hier dabei bewenden, dass sie natürlich ist, weil wir keinen Grund haben, im Phasenraum eine Position der anderen vorzuziehen.

Für die Wahrscheinlichkeitsdichte unseres Gases heißt das:

$$\rho = \rho(q_1, \dots, q_{3N}, p_1, \dots, p_{3N}) = \rho(p_1, \dots, p_{3N}) = \text{const.} \times \delta \left( E - \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m} \right). \quad (12.6)$$

Da wir die Energie nie wirklich exakt kennen können, ist es sowohl physikalischer als auch rechnerisch bequemer, nur

$$H \in [E - \Delta E, E] \quad (12.7)$$

zu fordern. Das entsprechende  $\rho$  (vgl. Abb. 62) ist innerhalb der so definierten Kugelschale konstant und sonst Null. Die Normierung, also der Wert innerhalb der Kugelschale, ist durch

$$\int_{\Gamma} d^{6N}\bar{\xi} \rho(\bar{\xi}) = V^N \int dp_1 \dots dp_{3N} \rho(p_1, \dots, p_{3N}) = V^N V_{\text{Kugelschale}} \rho_{\text{Kugelschale}} = 1 \quad (12.8)$$

festgelegt.

Bevor wir mit diesem etwas ad-hoc eingeführten Ensemble weiterarbeiten, wollen wir seine Konsistenz mit der Boltzmann-Verteilung prüfen.

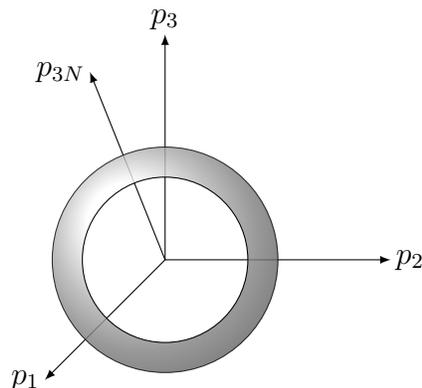


Abbildung 62: Anschauliche Darstellung der Forderung

## 12.5 Boltzmann-Verteilung als ‘wahrscheinlichste Verteilung’

Wir wollen eine Verbindung zwischen Phasenraumverteilungen  $f(\bar{q}, \bar{p})$  (also Funktionen auf dem  $\mu$ -Raum) und Wahrscheinlichkeitsdichten im  $N$ -Teilchen-Phasenraum (Funktionen auf dem  $\Gamma$ -Raum) herstellen. Dazu werden wir grundsätzlich beide Räume in kleine Zellen zerlegen, so dass alle Variablen nur diskrete Werte annehmen. Wir können das als der Messunsicherheit geschuldet betrachten. Eine bessere für uns aber noch etwas zu fortgeschrittene Sichtweise ist, dass in der Quantenmechanik ohnehin alles diskret wird.

In diesem Bild von einem in Zellen eingeteilten  $\mu$ - und  $\Gamma$ -Raum haben wir nun folgende **entscheidende Tatsache**: Einer Phasenraumverteilung  $f(\bar{q}, \bar{p})$  entspricht ein Gebiet  $\mathcal{O}[f]$  im  $\Gamma$ -Raum, mit einem Volumen  $\Omega[f]$ .

Wir illustrieren dies zunächst mit einem ‘Toy-Model’: Die sechs Variablen  $\bar{q}, \bar{p}$  ersetzen wir durch eine Variable  $x$ . Der Wertebereich von  $x$  bestehe außerdem nur aus zwei Zellen der Größe  $\Delta x$  (Abb. 63). Die Funktion  $f = f(x)$  nehme in jeder der beiden Zellen den Wert  $1/\Delta x$  an, so dass wir in jeder Zelle ein bzw. insgesamt zwei Teilchen haben.

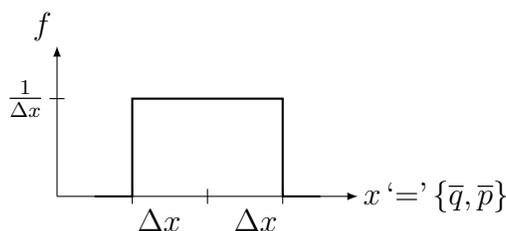


Abbildung 63: Toy-Model- $\mu$ -Raum mit  $N = \int dx f = 2$ , also 2 Teilchen, je eines pro Zelle.

Der  $\Gamma$ -Raum hat für ein Gas die Dimension  $6N$ , in unserem Toy-Model nur  $N$ . Da außerdem bei uns  $N = 2$  ist, haben wir nur einen 2-dimensionalen Raum, in dem auf jeder der Achsen der  $x$ -Wert jedes Teilchens abzulesen ist (Abb. 64). Wir sehen, dass

$$\Omega[f] = 2 \cdot \Delta x^2. \quad (12.9)$$

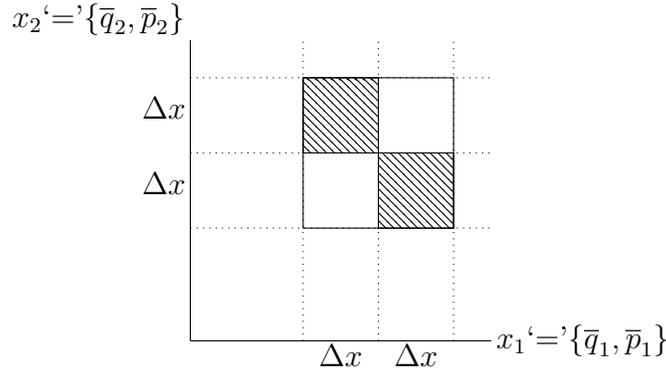


Abbildung 64: Volumen  $\Omega = 2\Delta x^2$  des Gebietes, das zu  $f$  gehört (schraffiert).

Wichtig ist, dass das in Abb. 64 schraffierte Volumen um einen Faktor 2 größer ist als die naive Erwartung  $\Delta x^2$ . Dies ist Ergebnis der fehlenden Information darüber, ‘welches der beiden Teilchen in welcher Zelle ist’. Die Verteilungsfunktion  $f$  hat diese Information nicht, aber im  $\Gamma$ -Raum entsprechen den beiden möglichen Situationen zwei verschiedene Zellen.

In unserem Gas nummerieren die wir nun die  $k$  Zellen des  $\mu$ -Raums ( $k \gg 1$ ), jede mit Volumen  $\Delta q^3 \Delta p^3 \equiv \omega$  durch einen Index  $i \in \{1, \dots, k\}$ . Die Verteilungsfunktion  $f$  wird damit zu einem Satz von Zahlen  $f_i$ , welche jeweils die Teilchendichte in Zelle  $i$  beschreiben:

$$n_i = \int_{\text{Zelle } i} d^3 \bar{q} d^3 \bar{p} f(\bar{q}, \bar{p}) = f_i \cdot \omega. \quad (12.10)$$

Wir werden die  $\omega$  zwar klein wählen, aber doch groß genug, damit in jeder Zelle immer noch viele Teilchen sind:  $n_i \gg 1$ .

Das diesem  $f$  entsprechende Volumen im  $\Gamma$ -Raum ist

$$\Omega[f] = \omega^N \cdot \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_k!}, \quad (12.11)$$

wobei der Faktor neben  $\omega^N$  das Analogon zum Faktor 2 des Toy-Modells ist. In der Tat ist  $N!/(n_1! n_2! \dots n_k!)$  die Zahl der Möglichkeiten,  $N$  Teilchen auf  $k$  Zellen zu verteilen, sodass die Zelle  $i$  gerade  $n_i$  Teilchen hat. Diese Information ist im  $\Gamma$ -Raum darstellbar, im  $\mu$ -Raum aber nicht. Daher entsteht beim Übergang von  $f$  zu  $\Omega$  dieser Zusatzfaktor.

Wir können nun eine Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho_f$  auf  $\Gamma$  einführen, die innerhalb von  $\mathcal{O}[f]$  konstant und sonst Null ist, und damit weiterarbeiten. Aber es ist einfacher, mit der Gleichwahrscheinlichkeitsannahme direkt zu schließen, dass die Wahrscheinlichkeit von  $f$  durch

$$P[f] = \Omega[f] / \Omega_\Gamma \quad (12.12)$$

ist, wobei wir mit  $\Omega_\Gamma$  das für uns relevante Gesamtvolumen des  $\Gamma$ -Raumes bezeichnen.

Wir interessieren uns nur für  $f$ s mit konstanter Energie  $E$  und entsprechend ist  $\Omega_\Gamma$  auch nur das Volumen des  $\Gamma$ -Raumes, welches zur Energie  $E$  gehört. Um das wahrscheinlichste  $f$

zu finden, suchen wir also das Maximum von  $\Omega[f]$  bzw. von

$$\ln \Omega = \ln N! - \sum_{i=1}^k \ln n_i! + \text{const.} \quad (12.13)$$

bezüglich der  $\{n_i\}$  unter den Nebenbedingungen

$$\sum_i n_i = N, \quad \sum_i E_i n_i = E, \quad (12.14)$$

wobei  $E_i$  die Energie zur Zelle  $i$  ist.

Dazu benutzen wir die **Stirling-Formel** (Beweisidee siehe Abb. 65)

$$\ln n! \simeq n \cdot (\ln n - 1) \quad (12.15)$$

sowie die Methode der Lagrange-Multiplikatoren (welche wir hier  $\alpha$  und  $\beta$  nennen):

$$\delta_{\alpha, \beta, \{n_i\}} \left\{ - \sum_i n_i (\ln n_i - 1) - \alpha \left( \sum_i n_i - N \right) - \beta \left( \sum_i E_i n_i - E \right) \right\} = 0. \quad (12.16)$$

Wir variieren also bzgl.  $\{n_i\}$ ,  $\alpha$  und  $\beta$  und fordern, dass das Ergebnis verschwindet.

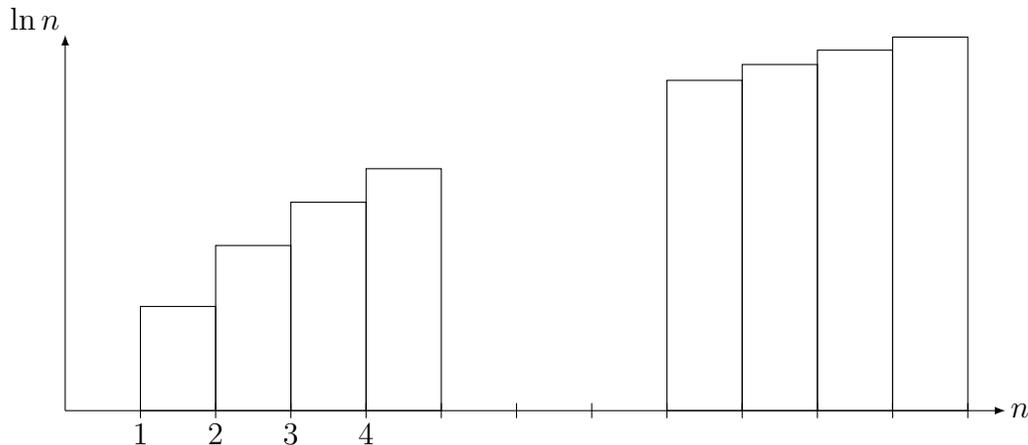


Abbildung 65: Beweisidee der Stirling-Formel: Schreibe  $\ln n!$  als Summe aus und fasse diese als ‘Riemann-Summe’ (mit  $\Delta x = \Delta n = 1$ ) für ein passendes Integral des Logarithmus auf.

Wir müssen demnach gleichzeitig

$$\partial_\alpha \{\dots\} = 0, \quad \partial_\beta \{\dots\} = 0, \quad \text{und} \quad \partial_{n_j} \{\dots\} = 0 \quad (12.17)$$

erfüllen. Die  $k$  letzten Gleichungen lauten

$$- \ln n_i - \alpha - \beta E_i = 0, \quad (12.18)$$

was

$$n_i = e^{-\alpha - \beta E_i} \quad (12.19)$$

liefert. Die ersten beiden Gleichungen sichern korrekte Gesamtteilchenzahl und Gesamtenergie und können durch richtige Wahl der ‘Konstanten’  $\alpha$  und  $\beta$  der Verteilung (12.19) befriedigt werden.

Wegen  $f_i = n_i/\omega$  sehen wir, dass wir die Maxwell-Boltzmann-Verteilung gefunden haben. Wir hatten diese schon dynamisch hergeleitet. Hier konnten wir sie mittels Gleichwahrscheinlichkeitsannahme begründen. Dieses Resultat stützt wiederum die Gleichwahrscheinlichkeitsannahme.

## 12.6 Das kanonische Ensemble

Im Gegensatz zum mikrokanonischen Ensemble wird beim kanonischen Ensemble die Energie nicht mehr fixiert. Stattdessen wird angenommen, dass sich das System im Gleichgewicht mit einem viel größeren System (Reservoir oder Wärmebad) befindet. Für das Gesamtsystem (System + Reservoir) darf man die Energie aber als fixiert annehmen. Wir werden sehen, dass dies einem System mit fester Temperatur entspricht.

Konkret im Fall unseres Gases sind also  $V_1, V_2$  sowie die zugehörigen Teilchenzahlen  $N$  und  $M$  fixiert. Nur Energie, nicht aber Teilchen können mit dem Reservoir ausgetauscht werden (Abb. 66). Aber die Summe  $E_{tot} = E_1 + E_2$  ist fest.

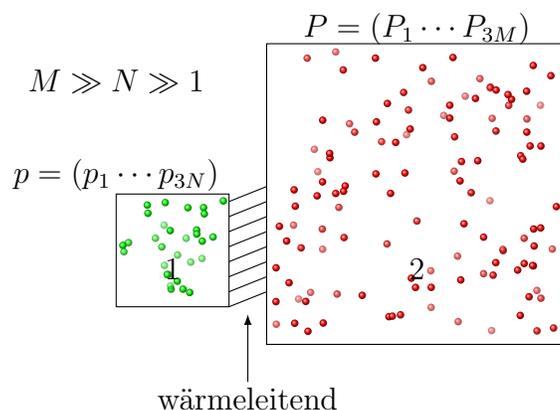


Abbildung 66: System (1) durch wärmeleitende Wand im Kontakt mit Wärmereservoir (2).

Wenn wir nun den Erwartungswert einer Observablen  $F = F(\bar{p})$  des Systems (1) berechnen wollen, so können wir vom mikrokanonischen Ensemble für das Gesamtsystem ausgehen. Dort wissen wir, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte proportional zu einer  $\delta$ -Funktion der Energie ist (Gleichwahrscheinlichkeitsannahme). Also gilt

$$\langle F \rangle = C \cdot \int d^{3N} \bar{p} d^{3M} \bar{P} F(\bar{p}) \delta(E_{tot} - H_1(\bar{p}) - H_2(\bar{P})) . \quad (12.20)$$

Hier ist  $C$  ein normierender Faktor in den wir auch die im Moment unwichtigen Integrale der Koordinaten über  $V_1, V_2$  absorbiert haben. Außerdem können wir als einfache Hamilton-

Funktionen z.B.

$$H_1(\bar{p}) = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m} \quad \text{und} \quad H_2(\bar{P}) = \sum_{i=1}^{3M} \frac{p_i^2}{2m} \quad (12.21)$$

annehmen.

Wir führen zunächst eine wichtige Nebenrechnung durch: Seien dazu die  $\bar{p}$  fest und  $E_1 \equiv H_1(\bar{p})$ . Wir wollen die Integration über  $\bar{P}$  ausführen:

$$I \equiv \int d^{3M} \bar{P} \delta(E_{tot} - E_1 - H_2(\bar{P})). \quad (12.22)$$

Die  $\delta$ -Funktion erzwingt, dass  $|\bar{P}| = \sqrt{2m(E_{tot} - E_1)}$ .  $I$  entspricht also einer Sphäre im  $3M$ -dimensionalen Raum mit Radius

$$R = \sqrt{2m(E_{tot} - E_1)}. \quad (12.23)$$

Nun ist natürlich (z.B. aus allein schon aus Dimensionsgründen)  $I \sim R^{3M-1}$ . Da  $M$  sehr groß ist, machen wir keinen wesentlichen Fehler, wenn wir  $3M - 1$  durch  $M$  ersetzen, also

$$I \sim R^{3M} \sim (E_{tot} - E_1)^{3M/2} \sim \left(1 - \frac{E_1}{E_{tot}}\right)^{3M/2}. \quad (12.24)$$

Diese Schritte sind erlaubt, da uns hier *nur* die  $E_1$ -Abhängigkeit interessiert. Weiterhin ist  $E_1 \ll E_{tot}$ , sodass

$$\left(1 - \frac{E_1}{E_{tot}}\right)^{3M/2} = \exp\left[\frac{3M}{2} \cdot \ln\left(1 - \frac{E_1}{E_{tot}}\right)\right] = \exp\left[\frac{3M}{2} \left(-\frac{E_1}{E_{tot}} - \frac{1}{2}\left(\frac{E_1}{E_{tot}}\right)^2 + \dots\right)\right]. \quad (12.25)$$

Jetzt betrachten wir den Grenzwert  $M \rightarrow \infty$ ,  $E_{tot} \rightarrow \infty$ , sodass  $E_{tot}/M = \text{const.}$  Anders gesagt, wir betrachten System 2 als (sehr großes!) Wärmebad mit konstanter Temperatur  $T$ , wobei  $kT/2 = E_{tot}/3M$  (vgl. Kapitel 11).

Der zweite Summand im Exponenten kann in diesem Grenzwert vernachlässigt werden:

$$M \left(\frac{E_1}{E_{tot}}\right)^2 = \frac{1}{M} \left(\frac{E_1}{E_{tot}/M}\right)^2 = \frac{1}{M} \left(\frac{E_1}{3kT/2}\right)^2 \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad M \rightarrow \infty. \quad (12.26)$$

Es folgt

$$I \sim e^{-E_1/kT}. \quad (12.27)$$

Hier endet unsere Nebenrechnung.

Benutzen wir nun dieses Ergebnis für  $I$  in unserer Formel für  $\langle F \rangle$ , so folgt

$$\langle F \rangle \sim \int d^{3N} \bar{p} F(\bar{p}) e^{-H_1(\bar{p})/kT}. \quad (12.28)$$

Unsere Rechnung geht auch durch, wenn wir eine nichttriviale  $\bar{q}$ -Abhängigkeit zulassen. Wir haben in der Tat nie benutzt, dass System 1 ein Gas ist. Das allgemeine Resultat ist demnach

$$\langle F \rangle = \frac{1}{Z} \int d^{3N} \bar{p} \int_V d^{3N} \bar{q} \cdot F(\bar{p}, \bar{q}) \cdot e^{-H(\bar{p}, \bar{q})/kT}. \quad (12.29)$$

Wir haben hier den Normierungsfaktor

$$Z = Z(T, V) = \int d^{3N}\bar{p} \int_V d^{3N}\bar{q} \cdot e^{-\frac{H(\bar{p}, \bar{q})}{kT}}, \quad (12.30)$$

eingeführt, der so gewählt ist, dass  $\langle 1 \rangle = 1$ . Dieser Normierungsfaktor heißt **Zustandssumme** und hat auch unabhängig von der konkreten Formel oben eine enorme Bedeutung in Thermodynamik und Statistik.

Vorausschauend erwähnen wir noch, dass die Physik eigentlich quantenmechanisch und der Phasenraum dadurch diskret ist. Genauer gesagt gibt es nur einen Zustand pro Zelle der Größe  $h^{3N}$ . Dies fällt in der makroskopischen Welt nicht auf, da das hier auftretende **Plancksche Wirkungsquantum**  $h$  sehr klein ist. Man ersetzt demnach besser

$$\int d^{3N}\bar{q} d^{3N}\bar{p} \rightarrow \int \frac{d^{3N}\bar{q} d^{3N}\bar{p}}{h^{3N}} = \sum_{\text{alle Zustände}}. \quad (12.31)$$

in unseren obigen Formeln für  $\langle F \rangle$  und  $Z$ . Der Wert von  $\langle F \rangle$  ändert sich dadurch natürlich nicht, aber  $Z$  ist jetzt dimensionslos und der Begriff *Zustandssumme* ergibt Sinn. Das Integral ist in vielen Situationen eine gute Näherung für die eigentlich physikalisch korrekte Summe.

## 12.7 Vergleich von mikrokanonischem und kanonischem Ensemble

Die Wahrscheinlichkeitsdichten auf  $\Gamma$ , parametrisiert durch  $p_1, \dots, p_{3N}, q_1, \dots, q_{3n}$ , sind

$$\rho_{mik} \sim \delta(E - H(\bar{p}, \bar{q})) \quad \text{und} \quad \rho_{kan} \sim e^{-\frac{H(\bar{p}, \bar{q})}{kT}}. \quad (12.32)$$

Entgegen dem Anschein sind diese Ensembles äquivalent, solange das System hinreichend groß ist. Um dies zu sehen, müssen wir beachten, dass die obigen Verteilungen stets unter einem  $d^{3N}\bar{p}$ -Integral auftreteten. Wir schreiben zunächst

$$\int d^{3N}\bar{p} \sim \int |\bar{p}|^{3N-1} d|\bar{p}| \sim \int E^{3N/2} dE. \quad (12.33)$$

Jetzt fügen wir die kanonische Verteilungsfunktion ein:

$$\int \rho_{kan} d^{3N}\bar{p} \sim \int dE E^{3N/2} e^{-E/kT} \sim \int dE e^{-g(E)}, \quad (12.34)$$

wobei wir

$$g(E) \equiv \frac{E}{kT} - \frac{3N}{2} \ln(E) \quad (12.35)$$

definiert haben. Man rechnet nun leicht nach, dass  $g$  ein extrem scharfes<sup>18</sup> Minimum bei  $E_{max} = 3NkT/2$  hat. Wir nennen die entsprechende Energie  $E_{max}$ , weil sich dieses Minimum in ein Maximum der für uns relevanten Funktion  $\exp(-g(E))$  übersetzt. Es gilt

$$e^{-g(E)} \simeq e^{-g(E_{max}) - \alpha(E - E_{max})^2} \sim e^{-\alpha(E - E_{max})^2}. \quad (12.36)$$

<sup>18</sup> Scharf heißt hier, dass bereits eine extrem kleine, relative Änderung von  $E$  zu einer  $\mathcal{O}(1)$ -Abweichung der Funktion  $g(E)$  vom Minimalwert führt:  $g(E_{max} + \Delta E) - g(E_{max}) = 1 \Rightarrow \Delta E/E \ll 1$ .

Diese letzte Funktion ist nun für alle praktischen Zwecke so gut wie die  $\delta$ -Funktion  $\delta(E_{max} - E)$ . Das kanonische Ensemble entspricht also, in Bezug auf Erwartungswerte der meisten Observablen, dem mikrokanonischen Ensemble mit  $E = E_{max} = 3NkT/2$ .

Entscheidend für die obige Herleitung ist, dass das Volumen einer Kugel in sehr vielen Dimensionen stark in der Nähe der Oberfläche konzentriert ist. Man muss sich dazu Abb. 67 mit sehr großem  $N$  denken. Hier entspricht  $\rho_{mik}$  einer dünnen Kugelschale. Hingegen entspricht  $\rho_{kan}$  dem Kugelvolumen bis zum einem gewissen Abschneide-Radius ( $\sim E_{max}$ ), der durch  $e^{-E/kT}$  erzwungen wird. Weil nun aber, wegen des großen Exponenten in  $|p|^{3N}$ , das Volumen in der Nähe der Oberfläche konzentriert ist, sind beide Verteilungen in Wirklichkeit sehr ähnlich.

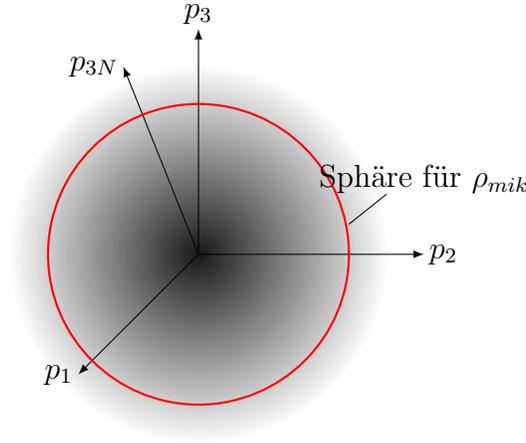


Abbildung 67:  $\rho_{kan}$  und  $\rho_{mik}$  im Vergleich.

## 13 Entropie und thermodynamische Potentiale

### 13.1 Erwartungswerte in gekoppelten Systemen

Bei der Herleitung des kanonischen Ensembles hatten wir System (1) und System (2), auch als Reservoir bezeichnet, gekoppelt und den Erwartungswert einer Observablen,  $\langle F \rangle$ , berechnet. Sei zur Einfachheit  $F = F(H_1)$ , so dass

$$\langle F \rangle \sim \int_{V_{(1)}} d^{3N}q \int d^{3N}p \cdot F(H_1(\bar{q}, \bar{p})) \int_{V_{(2)}} d^{3M}Q \int d^{3M}P \cdot \delta(E_{tot} - H_1(\bar{q}, \bar{p}) - H_2(\bar{Q}, \bar{P})) . \quad (13.1)$$

Wir wollen hier die verkürzte Notation

$$\int_{V_{(1)}} d^{3N}q \int d^{3N}p \equiv \int_{q,p} \quad (13.2)$$

und entsprechend für  $Q, P$  einführen. Dann gilt also

$$\langle F \rangle \sim \int_{q,p} F(H_1) \int_{Q,P} \delta(E_{tot} - H_1 - H_2) . \quad (13.3)$$

Nun führen wir eine  $\delta$ -Funktion und ein zugehöriges Integral ein, welches sich sofort ausführen lässt und das vorherige Ergebnis zurückgibt:

$$\langle F \rangle \sim \int dE \int_{q,p} F(H_1) \cdot \delta(E - H_1) \int_{Q,P} \delta(E_{tot} - E - H_2). \quad (13.4)$$

Da nun aber die  $\delta$ -Funktion  $E = H_1$  erzwingt, können wir dafür auch

$$\langle F \rangle \sim \int dE \cdot F(E) \int_{q,p} \delta(E - H_1) \int_{Q,P} \delta(E_{tot} - E - H_2) \quad (13.5)$$

schreiben. Jetzt definieren wir noch die sogenannte **Zustandsdichte** eines Systems mit Variablen  $q, p$ :

$$\omega(E) \equiv \int_{q,p} \delta(E - H(q, p)). \quad (13.6)$$

Damit können wir schreiben

$$\langle F \rangle \sim \int dE \cdot F(E) \cdot \omega_1(E) \cdot \omega_2(E_{tot} - E), \quad (13.7)$$

wobei  $\omega_1$  und  $\omega_2$  jeweils die Zustandsdichten der beiden Teilsysteme sind.

## 13.2 Zustandsdichte

Der oben eingeführte Begriff der Zustandsdichte ist neu und wichtig und bedarf der Erläuterung. Wir betrachten dazu ein System mit Variablen  $q, p$  und das **Phasenraumvolumen**  $\Sigma(E)$  von allen Zuständen mit Energie  $< E$ :

$$\Sigma(E) = \int_V d^{3N}q \int_{\mathbb{R}^{3N}} d^{3N}p \cdot \theta(E - H(\bar{q}, \bar{p})) = \int_{q,p} \theta(E - H); \quad \theta(x) \equiv \begin{cases} 0 & x \leq 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases}. \quad (13.8)$$

Wir haben hier die **Heaviside step function** oder auch  **$\theta$ -Funktion** eingeführt, vgl. Abb. 68.

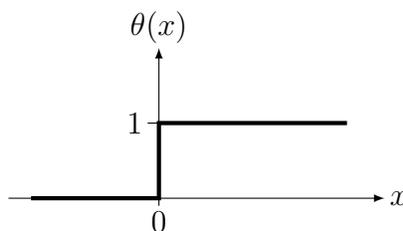


Abbildung 68: Die  $\theta$ -Funktion

Jetzt geben wir die alternative Definition der Zustandsdichte als

$$\omega(E) \equiv \frac{\partial \Sigma(E)}{\partial E} = \int_{q,p} \delta(E - H), \quad (13.9)$$

wobei wir im letzten Schritt benutzt haben, dass die Ableitung der  $\theta$ -Funktion gerade die  $\delta$ -Funktion ist:

$$\frac{d}{dx}\theta(x) = \delta(x). \quad (13.10)$$

Letzteres folgt rein formal, wenn wir uns an die Definition der  $\delta$ -Funktion erinnern. Die  $\delta$ -Funktion war durch

$$\int_{-a}^a \delta(x) dx = 1 \quad (13.11)$$

und die Forderung, dass sie bei jedem von Null verschiedenen Argument verschwindet, definiert. Nun gilt aber nach dem Hauptsatz der Analysis

$$\int_{-a}^a \theta'(x) dx = \theta(x)|_{-a}^a = 1 - 0 = 1. \quad (13.12)$$

Außerdem verschwindet  $\theta'$  offensichtlich überall außer bei der Null.

Wir können die Beziehung zwischen  $\omega$  und  $\Sigma$  (d.h. die zweite Definition von  $\omega$ ) auch explizit überprüfen, indem wir  $\omega$  integrieren:

$$\int_0^E dE' \omega(E') = \int_{q,p} \int_0^E dE' \delta(E' - H) = \int_{q,p} \begin{cases} 1 & H < E \\ 0 & H > E \end{cases} = \Sigma(E). \quad (13.13)$$

Es folgt wiederum

$$\omega(E) = \frac{\partial \Sigma(E)}{\partial E}. \quad (13.14)$$

Schließlich führen wir noch den Begriff des **Phasenraumvolumens des mikrokanonischen Ensembles mit kleinem aber endlichem Energieintervall** ein (vgl. Abb. 69):

$$\Gamma(E) = \Sigma(E + \Delta) - \Sigma(E) = \omega(E) \cdot \Delta. \quad (13.15)$$

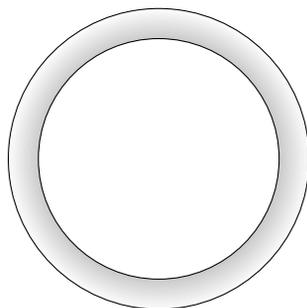


Abbildung 69: Phasenraumvolumen für kleines, aber endliches Energieintervall.

Man kann all diese Größen auch mit  $d^{3N}q d^{3N}p \rightarrow d^{3N}q d^{3N}p/h^{3N}$  definieren und quantenmechanisch interpretieren. Dadurch wird aus dem Phasenraumvolumen die Zustandszahl.

Insbesondere ist  $\omega(E)$  dann wirklich eine **Zustandsdichte**, weil es die Zahl der Zustände (also der Phasenraumzellen mit Volumen  $h^{3N}$ ) pro Energieintervall  $dE$  misst.

Da nun aber

$$\Sigma(E) \sim E^{\frac{3N}{2}}, \quad \omega(E) \sim \Gamma(E) \sim E^{\frac{3N}{2}-1} \quad (13.16)$$

gilt, sind  $\Sigma$ ,  $\omega$  und  $\Gamma$  bei sehr großem  $N$  für viele Zwecke austauschbar. Der Grund ist wiederum, dass das Volumen einer sehr hochdimensionalen Kugel unter der Oberfläche konzentriert ist.

### 13.3 Entropie

Wir kommen jetzt zu unserem Erwartungswert zurück:

$$\langle F \rangle \sim \int dE \cdot F(E) \cdot \omega_1(E) \cdot \omega_2(E_{tot} - E). \quad (13.17)$$

Der Hauptbeitrag zu diesem Integral kommt aus dem Bereich, wo  $\omega_1 \cdot \omega_2$  maximal ist. Das ist aber äquivalent zu dem Bereich, in dem  $\Gamma_1 \cdot \Gamma_2$  maximal ist, bzw. wo  $\ln(\Gamma_1) + \ln(\Gamma_2)$  maximal ist. Dazu muss die Ableitung verschwinden bzw. es muss gelten

$$\partial_{E_1} \ln(\Gamma(E_1)) = -\partial_{E_1} \ln(\Gamma(E_{tot} - E_1)). \quad (13.18)$$

Da  $E_2 \equiv E_{tot} - E_1$ , ist dies gleichbedeutend mit

$$\partial_{E_1} \ln(\Gamma(E_1)) = \partial_{E_2} \ln(\Gamma(E_2)). \quad (13.19)$$

Dies ist also die Bedingung, welche die im Gleichgewicht relevante (also wahrscheinlichste) Energieaufteilung auf die beiden Systeme bestimmt.

Sie legt die Definition der **Entropie** als

$$S(E, V) \equiv k \cdot \ln(\Gamma(E, V)) \quad (13.20)$$

nahe. Mit diesem Begriff bedeutet Gleichgewicht zweier Systeme, dass

$$\partial_{E_1} S_1(E_1) = \partial_{E_2} S_2(E_2) \quad (13.21)$$

gilt. Die **Temperatur** wird somit durch

$$\frac{1}{T} \equiv \frac{\partial S(E, V)}{\partial E} \quad (13.22)$$

definiert. Zwei Systeme sind also im Gleichgewicht, wenn ihre Temperatur gleich ist. Es ist wichtig, dass  $S \equiv k \ln(\omega)$  und  $S \equiv k \ln(\Sigma)$  äquivalente Definitionen sind – die Größe von  $\Delta$  ist insbesondere irrelevant.

Die Aussage  $S = k \cdot \ln(\Gamma)$  bedeutet, dass die Entropie der Logarithmus der Zahl der Zustände ist, welche den Makrozustand mit  $E$  und  $V$  realisieren. Man spricht deshalb auch von der Entropie als **Maß der Unordnung** bzw. **Maß unserer Unwissenheit**.

Als Konsistenzcheck zur Definition von  $T$  betrachten wir explizit

$$S = k \cdot \ln(E^{3N/2}) + \dots \quad (13.23)$$

und somit

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = k \cdot \partial_E \ln(E^{3N/2}) = k \cdot \frac{3N}{2} \cdot \frac{1}{E}. \quad (13.24)$$

Es folgt

$$\frac{E}{3N} = \frac{kT}{2}, \quad (13.25)$$

in Übereinstimmung mit unserer ersten Definition der Temperatur.

### 13.4 Die Innere Energie als thermodynamisches Potential des mikrokanonischen Ensembles

Wir haben gelernt  $S(E, V)$  zu berechnen. Wir haben somit

$$dS = \frac{\partial S}{\partial E} dE + \frac{\partial S}{\partial V} dV = \frac{dE}{T} + \frac{\partial S}{\partial V} dV \quad (13.26)$$

oder auch

$$dE = T dS - T \frac{\partial S}{\partial V} dV. \quad (13.27)$$

Oft schreibt man auch  $U$  statt  $E$  und bezeichnet diese Größe als die **Innere Energie**.

Unabhängig von der obigen Gleichung, wissen wir, dass Energieerhaltung gilt. Man bezeichnet diese Aussage als **1. Hauptsatz der Thermodynamik** und schreibt

$$dE = \delta Q - p dV. \quad (13.28)$$

Das Symbol  $\delta Q$  ('inexaktes Differential') steht für die vom System aufgenommene Wärme und soll insbesondere daran erinnern, dass es sich hier *nicht* um das totale Differential<sup>19</sup> einer Zustandsgröße handelt.

Der obige Ausdruck für  $dE$  und der 1. Hauptsatz gehen, wie man leicht sieht, ineinander über, falls

$$\frac{\partial S}{\partial V} = \frac{1}{T} p \quad \text{und} \quad \delta Q = T dS \quad (13.29)$$

gilt. Dies sind in der Tat korrekt Aussagen, wie wir jetzt zeigen werden. Zunächst wollen wir die erste Beziehung in (13.29) herleiten. Dazu schreiben wir

$$-\frac{\partial S}{\partial V} = -k \frac{\partial}{\partial V} \ln(\Sigma(E, V)) = -k \frac{\partial}{\partial V} \ln\left(\int_{\Gamma} \theta(E - H)\right) = -k \frac{\int_{\Gamma} \partial_V \theta(E - H)}{\int_{\Gamma} \theta(E - H)}. \quad (13.30)$$

Eine Volumenabhängigkeit von  $\theta(E - H)$  kommt dadurch zustande, dass man sich die Teilchen in einem Kasten, und damit in einem Potentialtopf, mit Volumen  $V$  eingesperrt denkt, vgl. Abb. 70. Damit haben wir also  $H(\bar{q}, \bar{p}) \rightarrow H(\bar{q}, \bar{p}, V)$ .

<sup>19</sup> Welches, wie wir gelernt haben, mit der äußeren Ableitung in Verbindung steht.

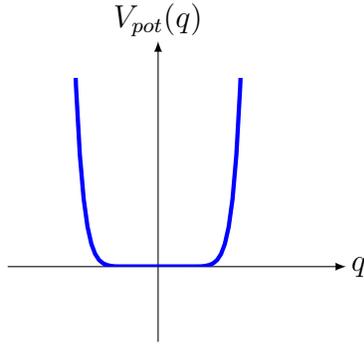


Abbildung 70: Potentialtopf als Modell für den Kasten mit Volumen  $V$ . (Die potentielle Energie  $V_{pot}$  hat nichts mit dem Volumen  $V$  zu tun.)

Wir brauchen jetzt nur zu beachten, dass

$$\langle \partial_V H \rangle = \frac{\int_{\Gamma} \delta(E - H) \partial_V H}{\int_{\Gamma} \delta(E - H)} \quad \text{bzw.} \quad \int_{\Gamma} \delta(E - H) \partial_V H = \langle \partial_V H \rangle \int_{\Gamma} \delta(E - H). \quad (13.31)$$

Damit können wir wie folgt weiterrechnen:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial S}{\partial V} &= -k \frac{\int_{\Gamma} \delta(E - H) (-\partial_V H)}{\int_{\Gamma} \theta(E - H)} = k \langle \partial_V H \rangle \frac{\int_{\Gamma} \delta(E - H)}{\int_{\Gamma} \theta(E - H)} \\ &= k \langle \partial_V H \rangle \partial_E \ln \left( \int_{\Gamma} \theta(E - H) \right) = \langle \partial_V H \rangle \partial_E (k \ln \Sigma(E, V)) \quad (13.32) \\ &= \partial_E S \langle \partial_V H \rangle = \frac{1}{T} \langle \partial_V H \rangle = -\frac{p}{T}. \end{aligned}$$

Im letzten Schritt haben wir dabei benutzt, dass

$$p \equiv - \left\langle \frac{\partial H}{\partial V} \right\rangle, \quad (13.33)$$

was natürlich gerade mit der anschaulichen Bedeutung des Drucks übereinstimmt. Man kann es auch als Definition des Drucks auffassen.

Wir haben also jetzt gezeigt, dass

$$\frac{\partial S}{\partial V} = -\frac{1}{T} \left\langle \frac{\partial H}{\partial V} \right\rangle = \frac{1}{T} p. \quad (13.34)$$

Damit haben wir

$$dE = T dS - p dV \quad \xrightarrow{1. \text{ Hauptsatz}} \quad dQ = T dS. \quad (13.35)$$

Hier nochmal zusammenfassend die beiden praktisch sehr wichtigen Beziehungen für die partiellen Ableitungen der Entropie:

$$p = T \frac{\partial S(E, V)}{\partial V} \quad \text{und} \quad \frac{1}{T} = \frac{\partial S(E, V)}{\partial E}. \quad (13.36)$$

Wenn wir aus diesen beiden Gleichungen  $E$  eliminieren (eine nach  $E$  auflösen und in die andere einsetzen), folgt die sogenannte **Zustandsgleichung**:

$$p = p(V, T) . \quad (13.37)$$

Man kann statt  $S = S(E, V)$  durch Auflösen nach  $E$  auch  $E = E(S, V)$  schreiben. Man nennt diese Funktion das **thermodynamische Potential des mikrokanonischen Ensembles**. Wir haben dann :

$$dE = \frac{\partial E}{\partial S} dS + \frac{\partial E}{\partial V} dV , \quad \frac{\partial E}{\partial S} = T , \quad \frac{\partial E}{\partial V} = -p . \quad (13.38)$$

Des Weiteren können wir z.B. die oben gefundene Beziehung  $1/T = \partial S(E, V)/\partial E$  nach  $E$  auflösen, um uns  $E = E(T, V)$  zu beschaffen. Ableiten nach  $T$  gibt dann die **spezifische Wärme bei konstantem Volumen**:

$$c_V = \frac{\partial E(T, V)}{\partial T} . \quad (13.39)$$

Viele weitere relevante Beziehungen können so gefunden werden.

Zusammenfassend sehen wir so, dass die gesamte Thermodynamik aus  $\Sigma(E, V)$  folgt. Und diese Funktion können wir mikroskopisch berechnen. Man muss sich also eigentlich nur

$$S = k \ln(\Sigma) , \quad T^{-1} = \frac{\partial S}{\partial E} \quad \text{und} \quad p = T \frac{\partial S}{\partial V} \quad (13.40)$$

einprägen.

### 13.5 Die freie Energie als thermodynamisches Potential des kanonischen Ensembles

Wir definieren die **freie Energie**  $F = F(T, V)$  gemäß

$$E = E(S, V) \quad \xrightarrow{\text{Legendre-Transformation in } S} \quad -F = -F(T, V) . \quad (13.41)$$

Genauer gesagt haben wir

$$T \equiv \frac{\partial E(S, V)}{\partial S} , \quad (13.42)$$

was wir stets zu

$$S = S(T, V) \quad (13.43)$$

umschreiben können. Außerdem gilt (völlig analog zum Übergang von  $L$  zu  $H$ , nur mit extra Vorzeichenwechsel)

$$F \equiv E(S(T, V), V) - T \cdot S(T, V) . \quad (13.44)$$

Damit gilt weiterhin

$$dF = -S dT - p dV . \quad (13.45)$$

Dies sieht man z.B. indem man die Beziehungen

$$dE = T dS - p dV \quad \text{und} \quad d(TS) = T dS + S dT \quad (13.46)$$

kombiniert:

$$dF = d(E - TS) = -S dT - p dV . \quad (13.47)$$

Man sagt auch: Die natürlichen unabhängigen Variablen zur Energie sind  $S$  und  $V$ . Entsprechend sind die natürlichen unabhängigen Variablen zur freien Energie  $T$  und  $V$ .

So wie man  $S$  aus der im mikrokanonische Fall zentralen Größe  $\Gamma(E, V)$  berechnet, so berechnet man auch  $F$  aus der im kanonischen Fall zentralen Größe  $Z(T, V)$  (der oben eingeführten Zustandssumme):

$$F = -kT \cdot \ln(Z(T, V)) . \quad (13.48)$$

Man könnte dies mit unseren Methoden ohne Weiteres herleiten, aber wir haben dazu keine Zeit mehr.

## 13.6 Schlusskommentare zum makroskopischen Zugang

Man kann  $S$  auch rein makroskopisch über  $dS \equiv dQ/T$  definieren. Dazu zeigt man (am idealen Gas, dessen Zustandsgleichung und innere Energie man auch ohne Statistik kennt), dass es eine **Zustandsgröße**  $S = S(E, V)$  gibt, sodass  $dQ = T \cdot dS$ . Man braucht dazu den Carnot-Prozess und den **2. Hauptsatz der Thermodynamik**. Letzterer besagt: “Es existiert keine periodisch arbeitende Maschine, welche nichts tut, als einem Reservoir Wärme zu entziehen und Arbeit zu verrichten”. Dies entspricht der Aussage

$$dS_{ges} \geq 0 \quad (13.49)$$

für alle Prozesse. Man kann damit  $S = S(E, V)$  nicht nur für das ideale Gas, sondern für *alle* Stoffe zu definieren.

Wir können auf diesen (sehr schönen und auch mathematisch sauber durchführbaren) Zugang zur Thermodynamik nicht mehr eingehen. Wenn wir aber die Existenz von  $S$  voraussetzen, können wir zumindest eine elegante Herleitung für den Wirkungsgrad des Carnot-Prozesses geben (vgl. Abb. 71):

$$\eta = \frac{\Delta W}{Q_2} = \frac{Q_2 - Q_1}{Q_2} = 1 - \frac{Q_1}{Q_2} = 1 - \frac{-T_1 \cdot \Delta S_1}{T_2 \cdot \Delta S_2} \quad \xrightarrow{\Delta S_1 + \Delta S_2 = 0} \quad \eta = 1 - \frac{T_1}{T_2} . \quad (13.50)$$

### Persönlicher Schlusskommentar

Nehmen Sie TP3 – 5 sehr ernst! Für diejenigen, welche an fundamentaler Teilchentheorie und Kosmologie (was immer weniger trennbar wird) arbeiten wollen: Hören Sie außerdem möglichst früh ART, QFT I und II und Kosmologie. Machen Sie viel Mathe (speziell Lie-Gruppen und deren Darstellungen, Differentialgeometrie, Topologie, komplexe Mannigfaltigkeiten). Lernen Sie Supersymmetrie und Stringtheorie – auch wenn Sie an etwas ganz anderem forschen wollen – Sie werde es zumindest als Sprache dringend brauchen.

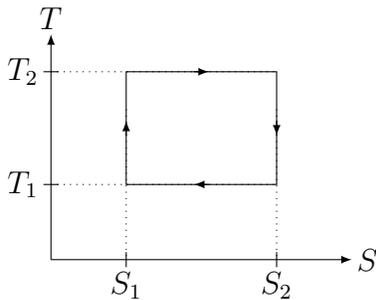


Abbildung 71: Carnot-Prozess: Die horizontalen Pfeile entsprechen Wärmezufuhr und Wärmeabgabe bei hoher und niedriger Temperatur. Die vertikalen Pfeile adiabatischer Expansion und Kompression.

Und falls Ihre Interessen in eine andere Richtung gehen: Lassen Sie sich von den entsprechenden Kollegen beraten, was Sie tun müssen, um z.B. in Festkörperphysik, Biophysik etc. möglichst schnell ‘fit’ zu werden.

## Literatur

- [1] Landau/Lifshitz, Lehrbuch der theoretischen Physik I: Mechanik.
- [2] Arnold, Mathematische Methoden der klassischen Mechanik.
- [3] Jose/Saletan, Classical Dynamics.
- [4] Feynman, Lectures on Physics, Vol. II, Chapter 19;  
[https://www.feynmanlectures.caltech.edu/II\\_19.html](https://www.feynmanlectures.caltech.edu/II_19.html)
- [5] C. G. Gray, Edwin F. Taylor: “When the action is not least”, Am. J. Phys., Vol. 75, No. 5, 2007; <https://www.eftaylor.com/pub/Gray&TaylorAJP.pdf>
- [6] [https://en.wikipedia.org/wiki/Ostrogradsky\\_instability](https://en.wikipedia.org/wiki/Ostrogradsky_instability);  
 R. P. Woodard, “Ostrogradsky’s theorem on Hamiltonian instability,” Scholarpedia **10** (2015) no.8, 32243 [arXiv:1506.02210 [hep-th]]; <https://arxiv.org/abs/1506.02210>.
- [7] Falkovich, Fluid Mechanics - A Short Course for Physicists.
- [8] Fasano/Marmi: Analytical Mechanics: An Introduction.
- [9] Huang: Statistical Mechanics.

### Mathematische Ergänzungen:

- [10] Lang/Pucker: Mathematische Methoden in der Physik.
- [11] Königsberger: Analysis 1 + 2.

- [12] Meyberg/Vachenauer: Höhere Mathematik 1 + 2.
- [13] Mary L. Boas: Mathematical Methods in the Physical Sciences.
- [14] Byron/Fuller: Mathematics of Classical and Quantum Physics.
- [15] Mathews/Walker: Mathematical Methods of Physics.
- [16] Flanders: Differential Forms with Applications to the Physical Sciences.

**Etwas leichter zugängliche Physik-Literatur – als Hilfestellung:**

- [17] Nolting: Klassische Mechanik, Bd. 1 + 2.
- [18] Rebhan: Theoretische Physik: Mechanik.
- [19] Fließbach: Mechanik.
- [20] Fowles: Analytical Mechanics.
- [21] Scheck: Mechanik.
- [22] Iro: A Modern Approach to Classical Mechanics.
- [23] Kitzka: Grundkurs Theoretische Mechanik.  
(Elementar, enthält aber einen Abschnitt zu Differentialformen!)

**Physik, anspruchsvoller:**

- [24] Goldstein/Poole/Safko: Classical Mechanics.
- [25] Kuypers: Klassische Mechanik.
- [26] Sommerfeld, Bd.1: Mechanik, Bd. 2: Mechanik der deformierbaren Medien.
- [27] Thirring, Bd.1 : Klassische Dynamische Systeme.
- [28] Kibble/Berkshire: Classical Mechanics.
- [29] Hand/Finch: Analytical Mechanics.

**Mathe, anspruchsvoller:**

- [30] Arfken/Weber: Mathematical Methods for Physicists.
- [31] Courant/Hilbert: Methoden der mathematischen Physik.
- [32] Morse/Feshbach: Methods of Theoretical Physics.

**Allgemeinere, ältere Bücher mit nützlichen Kapiteln zur Mechanik:**

- [33] Joos: Lehrbuch der Theoretischen Physik (Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G., Leipzig, 1964).
- [34] Gerthsen: Physik (Volk und Wissen, Leipzig, 1948).