

# Theoretische Physik II: Analytische Mechanik und Thermodynamik

Version SS 2024 — Tilman Plehn  
Original von Matthias Bartelmann

11. Juli 2024

- **Stellen Sie Fragen!**

- Sollten Sie Werbung für die Fachschaft oder anderes studentisches Engagement machen wollen, dann melden Sie sich gerne bei mir.
- Informationen zum Beispiel zur Organisation der Vorlesung und der Übungen gibt es in der Vorlesung.
- Die erste Übung zählt nicht zur Gesamtpunktzahl.
- Die weiteren Aufgaben werden freitags hochgeladen und müssen bis zum kommenden Freitag abgegeben werden, Besprechung am Montag danach.
- Übungsblätter können gerne in Kleingruppen bearbeitet werden. Die Lösungen werden einzeln abgegeben, und müssen in der Übungsgruppe vorgerechnet werden können.
- In den Tutorien werden die Aufgaben immer von Studierenden vorgerechnet, und dann gemeinsam besprochen. Alle Studierenden müssen mindestens einmal vorrechnen.
- Die letzte Vorlesung findet am 11.7. statt.
- Die Woche des 15.7. dient der Klausurvorbereitung (study week).
- 60% der Übungspunkte sind die Voraussetzung für die Klausurzulassung.
- Die beste Vorbereitung für die Klausur sind die Übungsblätter.
- Die Klausur findet am 23.7. nachmittags statt
- Zur Klausur können Sie ein doppelseitig beschriebenes oder bedrucktes DIN-A4-Blatt mitnehmen, weitere Hilfsmittel werden nicht benötigt.
- Es gibt eine Nachklausur am TBA

Herzlichen Dank an viele Studentinnen und Studenten, die das Skript kommentiert und korrigiert haben und damit sehr dazu beigetragen haben, es zu verbessern und verständlicher zu machen!

# Inhaltsverzeichnis

<b>I</b>	<b>Analytische Mechanik</b>	<b>1</b>
<b>1</b>	<b>Harmonische Schwingungen</b>	<b>2</b>
1.1	Harmonischer Oszillator . . . . .	2
1.1.1	Linearisierte Kraft . . . . .	2
1.1.2	Freie Schwingungen . . . . .	3
1.1.3	Komplexe Darstellung . . . . .	4
1.1.4	Hermitesche Matrizen . . . . .	4
1.2	Pendel . . . . .	5
1.2.1	Mathematisches Pendel . . . . .	5
1.2.2	Physikalisches Pendel . . . . .	6
1.2.3	Das Foucaultsche Pendel (Übung) . . . . .	7
1.3	Erzwungene Schwingungen, Resonanz . . . . .	7
1.3.1	Periodischem Antrieb . . . . .	7
1.3.2	Resonanz und Halbwertsbreite . . . . .	8
1.3.3	Lösung mit komplexer Darstellung . . . . .	9
1.3.4	Schwingung nach einem Kraftstoß . . . . .	10
<b>2</b>	<b>Schwingungen gekoppelter Systeme</b>	<b>11</b>
2.1	Parametrisierte Koordinaten . . . . .	11
2.2	Normalkoordinaten . . . . .	14
2.2.1	Transformation auf Normalkoordinaten . . . . .	14
2.2.2	Bestimmung der Normalkoordinaten . . . . .	15
2.2.3	Stabilität . . . . .	16

2.2.4	Gekoppelte Pendel . . . . .	17
<b>3</b>	<b>Systeme mit Nebenbedingungen</b>	<b>18</b>
3.1	Vorbereitung . . . . .	18
3.1.1	Verallgemeinerte Koordinaten . . . . .	18
3.1.2	Lagrange-Multiplikatoren . . . . .	19
3.2	Das d'Alembertsche Prinzip . . . . .	21
3.2.1	Zwangskräfte im Gleichgewicht . . . . .	21
3.2.2	Dynamische Systeme . . . . .	23
3.2.3	Lagrange-Gleichungen erster Art . . . . .	24
<b>4</b>	<b>Lagrange-Formulierung</b>	<b>27</b>
4.1	Lagrange-Gleichungen zweiter Art . . . . .	27
4.2	Kreisel . . . . .	29
4.2.1	Kräftefreier symmetrischer Kreisel . . . . .	29
4.2.2	Kreisel im Schwerfeld . . . . .	31
<b>5</b>	<b>Extremalprinzipien</b>	<b>33</b>
5.1	Prinzip der stationären Wirkung . . . . .	33
5.1.1	Das Fermatsche Prinzip . . . . .	33
5.1.2	Hamiltons Prinzip . . . . .	34
5.2	Hamilton-Funktion . . . . .	36
5.2.1	Phasenraum-Koordinaten . . . . .	36
5.2.2	Hamilton-Funktion und Energie . . . . .	38
5.2.3	Hamilton-Gleichungen und Wirkungsprinzip . . . . .	39
<b>6</b>	<b>Symmetrien und Erhaltungssätze</b>	<b>40</b>
6.1	Galilei-Invarianz . . . . .	40
6.2	Noether-Theorem . . . . .	42
6.3	Lorentz-Invarianz . . . . .	44
<b>7</b>	<b>Phasenraum</b>	<b>49</b>

7.1	Kanonische Transformationen . . . . .	49
7.1.1	Erweiterter Phasenraum . . . . .	49
7.1.2	Kanonische Transformationen . . . . .	50
7.1.3	Hamilton-Jacobi-Gleichung . . . . .	52
7.1.4	Harmonischer Oszillator . . . . .	53
7.1.5	Bewegung des freien Massenpunkts . . . . .	54
7.2	Lösung der Hamilton-Jacobi-Gleichung . . . . .	54
7.3	Liouvillescher Satz . . . . .	55
<b>8</b>	<b>Stabilität und Chaos</b>	<b>57</b>
8.1	Stabilität . . . . .	57
8.1.1	Bewegung in der Nähe des Gleichgewichts . . . . .	57
8.1.2	Asymmetrischer Kreisel . . . . .	59
8.1.3	Sätze zur Stabilität . . . . .	61
8.1.4	Attraktoren und van-der-Pol-Gleichung . . . . .	61
8.2	Chaos in der Himmelsmechanik . . . . .	62
8.2.1	Saturnmond Hyperion . . . . .	62
8.2.2	Chaotisches Taumeln auf der Ellipsenbahn . . . . .	64
<b>II</b>	<b>Statistik und Thermodynamik</b>	<b>66</b>
<b>9</b>	<b>Statistische Physik</b>	<b>67</b>
9.1	Informations-Entropie . . . . .	67
9.2	Grundpostulat . . . . .	71
9.2.1	Makrozustände . . . . .	71
9.2.2	Mikrozustände . . . . .	71
9.2.3	Anzahl zugänglicher Zustände . . . . .	73
9.3	Wechselwirkungen zwischen Systemen . . . . .	74
9.3.1	Gleichgewicht und Liouvillescher Satz . . . . .	74
9.3.2	Mechanische Arbeit und Wärme . . . . .	75
9.3.3	Unvollständige Differentiale . . . . .	76

9.3.4 Quasistatische Zustandsänderungen . . . . . 78

**10 Entropie 80**

10.1 Thermisches Gleichgewicht . . . . . 80

10.1.1 Reversible Zustandsänderungen . . . . . 80

10.1.2 Energie, Volumen, Teilchenzahl . . . . . 81

10.1.3 Temperatur . . . . . 82

10.1.4 Volumen-Austausch . . . . . 84

10.1.5 Teilchen-Austausch . . . . . 85

10.1.6 Zustandsgleichung . . . . . 86

10.2 Verteilungen . . . . . 87

10.2.1 Maxwell-Verteilung . . . . . 87

10.2.2 Boltzmann-Verteilung . . . . . 88

**11 Thermodynamik 90**

11.1 Thermodynamische Beziehungen . . . . . 90

11.1.1 Erster Hauptsatz . . . . . 90

11.2 Ideales Gas . . . . . 91

11.2.1 Zustandsgleichung . . . . . 91

11.2.2 Wärmekapazität . . . . . 93

11.2.3 Adiabatische Expansion . . . . . 94

11.2.4 Nicht-ideale Gase . . . . . 95

11.3 Thermodynamische Funktionen . . . . . 97

11.3.1 Legendre-Transformationen . . . . . 97

11.3.2 Freie Energie, Enthalpie und freie Enthalpie . . 98

11.3.3 Maxwell-Relationen . . . . . 99

**12 Kreisprozesse 101**

12.1 Carnot-Wirkungsgrad . . . . . 101

12.2 Carnot-Prozess . . . . . 102

12.3 Der Otto-Prozess . . . . . 103

# **Teil I**

## **Analytische Mechanik**

# Kapitel 1

## Harmonische Schwingungen

### 1.1 Harmonischer Oszillator

Bevor wir in diesem Semester Konzepte zur Berechnung komplexer mechanischer Systeme entwickeln, fassen wir noch einmal systematisch zusammen, was wir im vergangenen Semester über den harmonischen Oszillator gelernt haben.

#### 1.1.1 Linearisierte Kraft

- Auf einen Körper im mechanischen *Gleichgewicht* wirkt insgesamt keine Kraft,  $F = 0$ . Bei kleiner Auslenkung aus der Gleichgewichtslage  $x_0$  kann die Kraft getaylornt werden,

$$F = F(x_0) + F'(x_0)(x - x_0) + \dots \approx F'(x_0)(x - x_0) \quad (1.1)$$

Der Einfachheit halber verschieben nehmen wir  $x_0 = 0$  an. Wir *linearisieren* dann die Kraft und erhalten

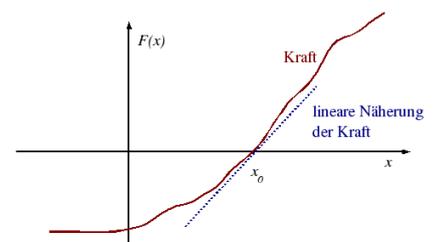
$$F = F'(0) x \quad (1.2)$$

- Das Gleichgewicht ist für  $F'(0) < 0$  stabil. Entsprechend schreiben wir für die *linearisierte* Kraft

$$F'(0) \equiv -k \quad \text{oder} \quad F(x) = -kx, \quad k > 0. \quad (1.3)$$

Die Bewegungsgleichung wird

$$m\ddot{x} = -kx \quad \Leftrightarrow \quad \ddot{x} + \omega_0^2 x = 0 \quad \text{mit} \quad \omega_0 := \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (1.4)$$



Entwicklung der Kraft um die Gleichgewichtslage

### 1.1.2 Freie Schwingungen

- Die Bewegungsgleichung (1.4) ist eine gewöhnliche, lineare, homogene Differentialgleichung zweiter Ordnung mit konstanten Koeffizienten. Zu ihrer Lösung brauchen wir also ein Fundamentalsystem aus zwei linear unabhängigen Lösungen. Wir sehen sofort das  $x_1(t) = \sin \omega_0 t$  und  $x_2(t) = \cos \omega_0 t$  die Gleichung lösen. Dass sie linear unabhängig voneinander sind sehen wir aus

$$x_1 \dot{x}_2 - x_2 \dot{x}_1 = -\omega_0 \sin^2 \omega_0 t - \omega_0 \cos^2 \omega_0 t = -\omega_0 \neq 0. \quad (1.5)$$

Die allgemeine Lösung der Bewegungsgleichung ist also

$$x(t) = C_1 \sin(\omega_0 t) + C_2 \cos(\omega_0 t). \quad (1.6)$$

Die Konstanten  $C_1, C_2$  legen wir durch den Anfangsort  $x_0$  und die Anfangsgeschwindigkeit  $v_0$  fest,

$$\begin{aligned} x(t=0) = x_0 &\Rightarrow C_2 = x_0 \\ \dot{x}(t=0) = v_0 &\Rightarrow C_1 = \frac{v_0}{\omega_0} \\ \Rightarrow x(t) &= \frac{v_0}{\omega_0} \sin(\omega_0 t) + x_0 \cos(\omega_0 t). \end{aligned} \quad (1.7)$$

- Mithilfe der Beziehung

$$A_0 \cos(x - y) = A_0 \sin x \sin y + A_0 \cos x \cos y \quad (1.8)$$

lässt sich die allgemeine Lösung auch in die Form

$$x(t) = A_0 \cos(\omega_0 t - \delta_0) \quad (1.9)$$

bringen. Dazu setzt man  $x = \omega_0 t$  sowie  $A_0 \cos y = x_0$  und  $A_0 \sin y = v_0/\omega_0$  und erhält

$$A_0 = \sqrt{x_0^2 + \frac{v_0^2}{\omega_0^2}} \quad (1.10)$$

und

$$\tan \delta_0 = \frac{v_0}{x_0 \omega_0}. \quad (1.11)$$

$A_0 \geq 0$  heißt Amplitude,  $\omega_0 t - \delta_0$  Phase der Schwingung. Dabei ist  $0 \leq \delta_0 < 2\pi$ .

- Die durch (1.9) bzw. (1.10) beschriebene Bewegung heißt *harmonische Schwingung*. Sie hat die *Kreisfrequenz*  $\omega_0$ , die *Frequenz*  $\nu_0$ , und die *Schwingungsperiode*  $T$ ,

$$\nu_0 = \frac{\omega_0}{2\pi} \Rightarrow T = \frac{1}{\nu_0} = \frac{2\pi}{\omega_0}. \quad (1.12)$$

### 1.1.3 Komplexe Darstellung

- Wir können zur Beschreibung des harmonischen Oszillators komplexe Zahlen nutzen,  $x \rightarrow z$ , indem wir die Bewegungsgleichung (1.4) mit  $2\dot{z}$  als integrierendem Faktor multiplizieren,

$$2\dot{z}\ddot{z} + 2\omega_0^2\dot{z}z = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d(\dot{z}^2)}{dt} = -\omega_0^2 \frac{d(z^2)}{dt}. \quad (1.13)$$

Jetzt kann sie integriert werden und ergibt modulo einer Konstanten, die wir zunächst vernachlässigen

$$\dot{z}^2 = -\omega_0^2 z^2 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\dot{z}}{z} = \pm i\omega_0 \quad \Leftrightarrow \quad z = e^{\pm i\omega_0 t}. \quad (1.14)$$

- Diese beiden Lösungen sind linear unabhängig, denn

$$\left| -i\omega_0 e^{i\omega_0 t} e^{-i\omega_0 t} - i\omega_0 e^{-i\omega_0 t} e^{i\omega_0 t} \right| = 2\omega_0 \neq 0. \quad (1.15)$$

Eine komplexe Lösung hat keinen physikalisch offensichtlichen Sinn, so dass man für eine physikalische Aussage ihre Real- oder Imaginärteile wählt.

### 1.1.4 Hermitesche Matrizen

- Diese einführende Diskussion führt und zur komplexen Erweiterung der symmetrischen Matrizen. Wenn man alle Elemente einer Matrix  $a_{ij} \in \mathbb{C}$  komplex konjugiert,  $A^* = (a_{ij}^*)$ , und sie zusätzlich transponiert, heißt sie adjungiert,

$$A^\dagger = (A^*)^T = (a_{ji}^*). \quad (1.16)$$

Matrizen, die gleich ihren Adjungierten sind,

$$A = A^\dagger, \quad (1.17)$$

- Seien nun  $A$  eine hermitesche Matrix,  $\lambda_i$  und  $\lambda_j$  zwei ihrer Eigenwerte und  $v_i$  und  $v_j$  die zugehörigen Eigenvektoren, also

$$Av_i = \lambda_i v_i \quad \text{und} \quad Av_j = \lambda_j v_j. \quad (1.18)$$

Durch Multiplikation der ersten Gleichung mit  $v_j^\dagger$  und der zweiten mit  $v_i^\dagger$  erhalten wir

$$\begin{aligned} v_j^\dagger Av_i &= v_j^\dagger \lambda_i v_i = \lambda_i \langle v_j, v_i \rangle \\ \text{und} \quad v_i^\dagger Av_j &= v_i^\dagger \lambda_j v_j = \lambda_j \langle v_i, v_j \rangle, \end{aligned} \quad (1.19)$$

denn das Skalarprodukt zweier komplexwertiger Vektoren ist

$$\langle v, w \rangle = v^\dagger \cdot w = (w^\dagger \cdot v)^\dagger \equiv (w^\dagger \cdot v)^* = \langle w, v \rangle^*. \quad (1.20)$$

Diese Form garantiert  $\langle v, v \rangle \geq 0$ . Die adjungierte zweite Gleichung in (1.19) wird dann

$$v_j^\dagger A^\dagger v_i = v_j^\dagger A v_i = \lambda_j^* \langle v_i, v_j \rangle^* = \lambda_j^* \langle v_j, v_i \rangle \quad \text{mit} \quad A^\dagger = A. \quad (1.21)$$

Subtrahieren wir sie von der ersten Gleichung in (1.19), folgt

$$0 = (\lambda_i - \lambda_j^*) \langle v_j, v_i \rangle. \quad (1.22)$$

Für  $i = j$  folgt wegen  $\langle v_i, v_i \rangle > 0$  damit  $\lambda_i = \lambda_i^*$ , die Eigenwerte sind *reell*. Für  $i \neq j$  sieht man, dass Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten hermitescher Matrizen *orthogonal* sein müssen.

- Schließlich sei noch erwähnt, dass unitäre Matrizen  $U$  solche sind, deren Adjungierte gleich ihren Inversen sind,

$$U^\dagger = U^{-1}. \quad (1.23)$$

Sie verallgemeinern die Beziehung  $R^T = R^{-1}$  orthogonaler Matrizen.

## 1.2 Pendel

In einigen Beispielen zeigen wir, wie sich auch kompliziertere Schwingungen mit Hilfe der komplexen Zahlen lösen lassen. Das bedeutet nicht, dass man nicht auch mit den üblichen trigonometrischen Funktionen zum Erfolg kommt, aber diese Rechnung wäre komplizierter.

### 1.2.1 Mathematisches Pendel

- Ein Massenpunkt der Masse  $M$  sei im homogenen Gravitationsfeld an einem masselosen Faden der Länge  $l$  aufgehängt. Das Pendel bewege sich in der  $x$ - $y$ -Ebene. Für einen kleinen Auslenkwinkel  $\phi$  aus der Ruhelage zeigt der Faden in die Richtung

$$\begin{aligned} \vec{x} &= l (\sin \phi \vec{e}_x - \cos \phi \vec{e}_y) \approx -l \vec{e}_y \\ \Rightarrow \dot{\vec{x}} &= l \dot{\phi} (\cos \phi \vec{e}_x + \sin \phi \vec{e}_y) \approx l \dot{\phi} \vec{e}_x \\ \Rightarrow \ddot{\vec{x}} &= l \ddot{\phi} (\cos \phi \vec{e}_x + \sin \phi \vec{e}_y) + l \dot{\phi}^2 (-\sin \phi \vec{e}_x + \cos \phi \vec{e}_y) \\ &\approx l \ddot{\phi} \vec{e}_x + l \dot{\phi}^2 \vec{e}_y. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Die Gravitationskraft zeigt immer nach unten,

$$\vec{F} = -Mg \vec{e}_y, \quad (1.25)$$

wobei  $g$  die Schwerebeschleunigung ist. Senkrecht zum Pendel wirkt also die Rückstellkraft

$$\begin{aligned}\vec{F}_r &= \vec{F} - (\vec{F} \cdot \hat{x}) \hat{x} \\ &= -Mg\vec{e}_y - Mg \cos \phi (\sin \phi \vec{e}_x - \cos \phi \vec{e}_y) \\ &= -\sin^2 \phi Mg\vec{e}_y - Mg \cos \phi \sin \phi \vec{e}_x \approx -Mg\phi \vec{e}_x .\end{aligned}\quad (1.26)$$

Mit dieser Kraft ist der führende Term der Bewegungsgleichung

$$-Mg\phi \vec{e}_x = Ml\ddot{\phi} \vec{e}_x \quad \Leftrightarrow \quad \ddot{\phi} + \frac{g}{l}\phi = 0 .\quad (1.27)$$

Das ist offensichtlich eine harmonische Oszillorgleichung für  $\phi$ . Die Schwingungsfrequenz  $\omega = \sqrt{g/l}$  ist unabhängig von der Masse  $M$  des Pendelkörpers.

### 1.2.2 Physikalisches Pendel

- Nun ersetzen wir den Massenpunkt durch eine homogene Scheibe der Masse  $M$ , Dicke  $d$  und Radius  $R$ , die in ihrem Schwerpunkt an einer Pendelstange der Länge  $l$  fixiert wird und rotiert. Ändert sich dadurch das Verhalten des Pendels?
- Für die Bewegungsgleichung benötigen wir das Trägheitsmoment des Pendels. In Zylinderkoordinaten, in denen  $\hat{z}$  senkrecht zur Scheibe steht und der Ursprung im Scheibenmittelpunkt liegt, ist das Hauptträgheitsmoment  $\Theta_{33}$  der Scheibe

$$\begin{aligned}\Theta_{33} &= \int_0^R r dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-d/2}^{d/2} dz \rho (\vec{x}^2 \delta_{33} - z^2) \\ &= \rho \int_0^R r dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-d/2}^{d/2} dz ((r^2 + z^2) - z^2) \\ &= \rho \int_0^R r^3 dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-d/2}^{d/2} dz \\ &= \rho \frac{R^4}{4} 2\pi d = \frac{MR^2}{2} \quad \text{mit } M = \rho\pi R^2 d .\end{aligned}\quad (1.28)$$

Das gesamte Trägheitsmoment des Pendels ist damit

$$\Theta = \frac{MR^2}{2} + Ml^2 .\quad (1.29)$$

Die Drehimpulsänderung in die  $z$ -Richtung ist dann

$$\dot{\vec{L}} = \Theta \dot{\vec{\omega}} = \Theta \ddot{\phi} \vec{e}_z = M \left( \frac{R^2}{2} + l^2 \right) \ddot{\phi} \vec{e}_z .\quad (1.30)$$

- Das antreibende Drehmoment der Gravitation am Schwerpunkt ist

$$\begin{aligned} \vec{M} &= \vec{F} \times \vec{x} \\ &= \vec{F} \times l\hat{x} = -Mg\vec{e}_y \times l \sin \phi \vec{e}_x \\ &\approx Mgl\phi(\vec{e}_y \times \vec{e}_x) = -Mgl\phi\vec{e}_z. \end{aligned} \quad (1.31)$$

woraus für die Bewegungsgleichung  $\vec{M} = \dot{\vec{L}}$  in einer Dimension

$$\left(\frac{R^2}{2} + l^2\right)\ddot{\phi} + gl\phi = 0 \quad (1.32)$$

folgt. Das relative Vorzeichen entspricht der Bedingung, dass das Gleichgewicht stabil ist. Die Schwingungsfrequenz

$$\omega = \sqrt{\frac{2gl}{R^2 + 2l^2}}. \quad (1.33)$$

hängt nach wie vor nicht von der Pendelmasse ab, wird aber mit zunehmendem Scheibenradius kleiner. Für  $R \rightarrow 0$  bekommen wir das Ergebnis für das mathematische Pendel, (1.27).

### 1.2.3 Das Foucaultsche Pendel (Übung)

## 1.3 Erzwungene Schwingungen, Resonanz

### 1.3.1 Periodischem Antrieb

- Auf den Massenpunkt mit einer allgemeinen Bewegungsgleichung wirke nun eine periodische Kraft  $F_e = c \cos(\omega t)$ ,

$$m\ddot{x} + b\dot{x} + kx = c \cos(\omega t) \quad (1.34)$$

wird. Wir lösen die Gleichung wieder in der komplexen Ebene,

$$m\ddot{z} + b\dot{z} + kz = c e^{i\omega t} \quad (1.35)$$

mit  $z(t) \in \mathbb{C}$ , wobei die physikalische Lösung der Realteil der komplexen Lösung sein wird.

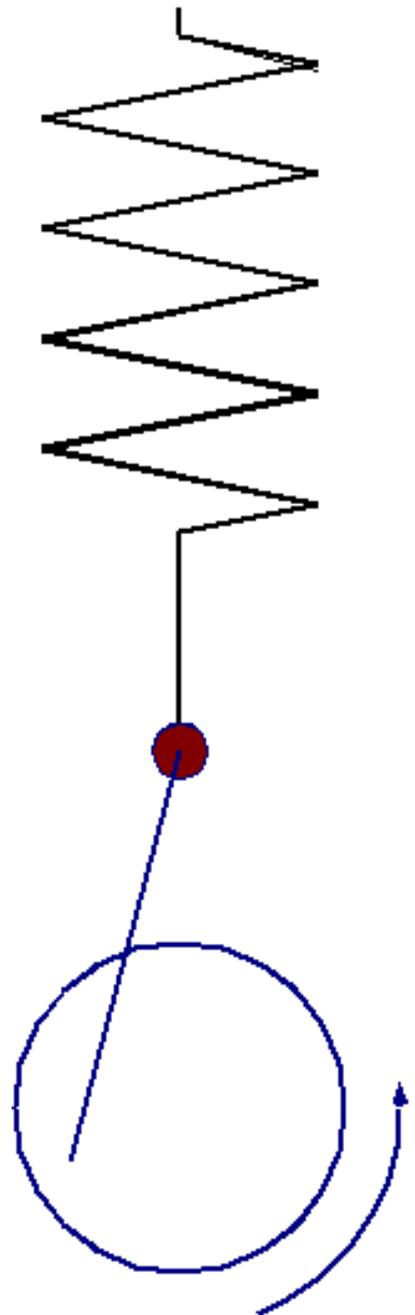
...(Übung mit Ansatz für spezielle Lösung)...

Die allgemeine Lösung für die erzwungene Schwingung ist

$$x(t) = A \cos(\omega t - \delta) + \bar{A}e^{-\lambda t} \cos(\bar{\omega}t - \bar{\delta}), \quad (1.36)$$

mit der Amplitude und Phase

$$A = \frac{c/m}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\omega^2\lambda^2}} > 0 \quad \tan \delta = \frac{2\omega\lambda}{\omega_0^2 - \omega^2}. \quad (1.37)$$



erzwungene Schwingung: Federpendel mit periodischem Antrieb

und

$$\lambda = \frac{b}{2m} \quad \omega_0^2 = \frac{k}{m} \quad \bar{\omega} = \sqrt{\omega_0^2 - \lambda^2}, \quad (1.38)$$

falls  $\lambda < \omega_0$  ist.  $\bar{A}$  und  $\bar{\delta}$  stehen noch zur Erfüllung der Anfangsbedingungen zur Verfügung.

- Für lange Zeiten  $t \gg 1/\lambda$  verschwindet der zweite Term mit seiner exponentiellen Dämpfung. Nach einer *Einschwingung* schwingt der Oszillator dann mit derselben Frequenz wie die äußere Kraft, aber um die Phase  $\delta$  verschoben.

### 1.3.2 Resonanz und Halbwertsbreite

- Die Amplitude  $A$  aus (1.37) zeigt das typische *Resonanzverhalten*. Nach der Kettenregel erreicht sie ein Maximum bei

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{d\omega} \left( (\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\omega^2\lambda^2 \right) = 2(\omega_0^2 - \omega^2)(-2\omega) + 8\omega\lambda^2 \\ &= 4\omega \left( -\omega_0^2 + \omega^2 + 2\lambda^2 \right) \end{aligned} \quad (1.39)$$

$$\text{oder } \omega_{\max} = \sqrt{\omega_0^2 - 2\lambda^2} \approx \omega_0 \left( 1 - \frac{\lambda^2}{\omega_0^2} + \mathcal{O}\left(\frac{\lambda^3}{\omega_0^3}\right) \right),$$

wenn wir für schwache Dämpfung taylorln,  $\lambda \ll \omega_0$ . Ohne Dämpfung ist die Resonanzfrequenz identisch mit der Frequenz des freien Pendels, bei kleiner Dämpfung beginnen sich die beiden zu unterscheiden. Das Maximum erreicht die Höhe

$$A_{\max} = \frac{c/m}{\sqrt{(2\lambda^2)^2 + 4(\omega_0^2 - 2\lambda^2)\lambda^2}} = \frac{c/m}{2\lambda\sqrt{\omega_0^2 - \lambda^2}}. \quad (1.40)$$

- Die Halbwertsbreite der Intensität ist durch die Bedingung

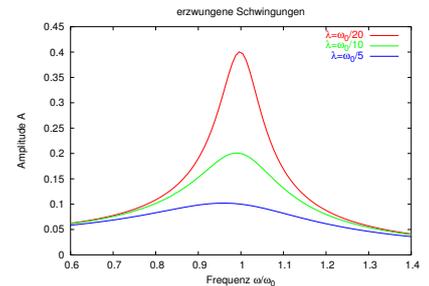
$$A^2(\omega_{1,2}) = \frac{1}{2}A_{\max}^2 \quad (1.41)$$

definiert. Sie führt zur Bedingung

$$\begin{aligned} \frac{c^2/m^2}{(\omega_0^2 - \omega_{1,2}^2)^2 + 4\omega_{1,2}^2\lambda^2} &= \frac{c^2/m^2}{8\lambda^2(\omega_0^2 - \lambda^2)} \\ \Leftrightarrow \omega_0^4 - 2\omega_0^2\omega_{1,2}^2 + \omega_{1,2}^4 + 4\omega_{1,2}^2\lambda^2 &= 8\lambda^2\omega_0^2 - 8\lambda^4 \\ \Leftrightarrow \omega_{1,2}^4 - 2\omega_{1,2}^2\omega_{\max}^2 + \omega_0^4 - 8\lambda^2\omega_0^2 + 8\lambda^4 &= 0, \end{aligned} \quad (1.42)$$

mit der Lösung

$$\begin{aligned} \omega_{1,2}^2 &= \omega_{\max}^2 \pm \sqrt{\omega_{\max}^4 - \omega_0^4 + 8\lambda^2\omega_0^2 - 8\lambda^4} \\ &= \omega_{\max}^2 \pm \sqrt{6\lambda^2\omega_0^2 - 4\lambda^4} \\ &\approx \omega_0^2 \left( 1 \pm \frac{\sqrt{6}\lambda}{\omega_0} \right) \left( 1 + \mathcal{O}\left(\frac{\lambda^2}{\omega_0^2}\right) \right) \end{aligned} \quad (1.43)$$



Resonanzverhalten der Amplitude erzwungener Schwingungen

oder

$$\omega_{1,2} \approx \omega_0 \left( 1 \pm \frac{\sqrt{3}\lambda}{\sqrt{2}\omega_0} \right) = \omega_0 \pm \frac{\sqrt{3}\lambda}{\sqrt{2}} . \quad (1.44)$$

Die komplette Halbwertsbreite für schwache Dämpfung ist damit

$$\Gamma = \sqrt{6}\lambda . \quad (1.45)$$

### 1.3.3 Lösung mit komplexer Darstellung

- Für getriebene Schwingungen haben wir die spezielle Lösung der inhomogenen Gleichung durch einen Ansatz erraten. Es gibt aber ein allgemeines Konstruktionsverfahren, bei dem wir von der ungedämpften Gleichung ausgehen,

$$\begin{aligned} \ddot{x} + \omega_0^2 x &= \frac{F(t)}{m} \\ \Leftrightarrow \frac{d}{dt} (\dot{x} + i\omega_0 x) - i\omega_0 (\dot{x} + i\omega_0 x) &= \frac{F(t)}{m} . \end{aligned} \quad (1.46)$$

Mit  $\xi(t) = \dot{x}(t) + i\omega_0 x(t)$  reduziert sich die Bewegungsgleichung auf eine Differentialgleichung erster Ordnung,

$$\dot{\xi} - i\omega_0 \xi = \frac{F(t)}{m} . \quad (1.47)$$

Da  $x(t)$  reell sein muss, folgt am Ende  $x(t) = \Im(\xi(t))/\omega_0$ .

- Die homogene Gleichung hat die allgemeine Lösung

$$\dot{\xi} = i\omega_0 \xi \quad \Rightarrow \quad \xi(t) = A e^{i\omega_0 t} + \xi_0 . \quad (1.48)$$

Durch Variation der Konstanten,

$$A \rightarrow A(t) \quad \Rightarrow \quad \dot{\xi}(t) = (\dot{A} + i\omega_0 A) e^{i\omega_0 t} , \quad (1.49)$$

erhalten wir die Lösung der inhomogenen Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned} (\dot{A} + iA\omega_0) e^{i\omega_0 t} - i\omega_0 A e^{i\omega_0 t} &= \dot{A} e^{i\omega_0 t} = \frac{F(t)}{m} \\ \Rightarrow A(t) &= \int_0^t \frac{F(t')}{m} e^{-i\omega_0 t'} dt' \\ \Rightarrow \xi(t) &= e^{i\omega_0 t} \int_0^t \frac{F(t')}{m} e^{-i\omega_0 t'} dt' + \xi_0 . \end{aligned} \quad (1.50)$$

### 1.3.4 Schwingung nach einem Kraftstoß

- Als letztes Beispiel betrachten wir eine Kraft, die zwischen den Zeiten  $t = 0$  und  $t = \tau$  den konstanten Betrag  $F_0$  hat und sonst verschwindet. Nach (1.50) ist dann

$$\xi(t) = \xi_0 + e^{i\omega_0 t} \left( \int_0^\tau + \int_\tau^t \right) \frac{F(t')}{m} e^{-i\omega_0 t'} dt' . \quad (1.51)$$

mit der Lösung

$$\xi(t) = \xi_0 + e^{i\omega_0 t} \begin{cases} 0 & t < 0 \\ \frac{iF_0}{m\omega_0} (e^{-i\omega_0 t} - 1) & t = 0 \dots \tau \\ \frac{iF_0}{m\omega_0} (e^{-i\omega_0 \tau} - 1) & t > \tau \end{cases} . \quad (1.52)$$

- Wenn wir verlangen, dass der Oszillator anfangs in Ruhe ist, also  $\dot{x} = 0 = \dot{x}$  für  $t < 0$ , dann ist  $\xi_0 = 0$  und

$$\xi(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ \frac{iF_0}{m\omega_0} (1 - e^{i\omega_0 t}) & t = 0 \dots \tau \\ \frac{iF_0}{m\omega_0} (e^{i\omega_0(t-\tau)} - e^{i\omega_0 t}) & t \geq \tau \end{cases} . \quad (1.53)$$

Die physikalische Lösung ist dann

$$x(t) = \frac{\Im \xi(t)}{\omega_0} = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ \frac{F_0}{m\omega_0^2} (1 - \cos \omega_0 t) & t = 0 \dots \tau \\ \frac{F_0}{m\omega_0^2} (\cos \omega_0(t - \tau) - \cos \omega_0 t) & t > \tau . \end{cases} \quad (1.54)$$

# Kapitel 2

## Schwingungen gekoppelter Systeme

Bislang haben wir uns physikalisch vor allem mit der Bewegung punktförmiger Körper in Raum und Zeit befasst. Die formale Grundlage waren Newtons Axiome. Als alternativen Weg zur Beschreibung eines sich bewegenden Teilchens haben wir Erhaltungssätze genutzt. Zum Beispiel haben wir Energieerhaltung aus der Newtonschen Mechanik mit Hilfe eines integrierenden Faktors abgeleitet. Zwei Aspekte haben wir nicht wirklich zufriedenstellend behandeln können: allgemeine Nebenbedingungen und Systeme mit mehr als einem Teilchen. Hier benötigen wir einen Formalismus, der die Newtonschen Axiome ersetzt.

### 2.1 Parametrisierte Koordinaten

Bei der Diskussion des Pendels haben wir die Koordinaten  $\vec{x}$  durch einen Winkel  $\phi$  ausgedrückt, wenn sich der Massenpunkt auf einer Kreislinie in einer Ebene bewegt. Dadurch wird die Anzahl der Freiheitsgrade von allgemein drei auf einen relevanten Freiheitsgrad reduziert. Ein weiteres Beispiel sind zwei Pendel, die durch eine Stange zwischen ihren beiden Massen verbunden sind. Die Kopplung zwischen den Pendeln reduziert die sechs Freiheitsgrade ebenfalls auf einen. Die Frage ist, wie man diese Reduktion auf die kleinste Zahl notwendiger Freiheitsgrade formalisieren kann.

- Wir betrachten  $N$  Massenpunkte mit  $3N$  Freiheitsgraden, die aneinander gekoppelt sind, so dass  $f$  Freiheitsgrade bleiben. Zur Beschreibung der Bewegung brauchen wir  $f$  Parameter  $q_k(t)$ , von

denen die Raumkoordinaten  $x_j(t)$  abhängen,

$$x_j = x_j[q_k(t)] \quad \Rightarrow \quad \dot{x}_j = \frac{\partial x_j}{\partial q_k} \dot{q}_k \quad (2.1)$$

Wir können auch umgekehrt  $q_k$  durch die  $x_j$  darstellen,

$$\dot{q}_k = \frac{\partial q_k}{\partial x_j} \dot{x}_j \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial \dot{x}_j} = \frac{\partial q_k}{\partial x_j} . \quad (2.2)$$

- Damit können wir die kinetische Energie eines Massenpunkts  $m^{(i)}$  am Ort  $\vec{x}$  durch die  $q_k$  auszudrücken,

$$T^{(i)} = \frac{m^{(i)}}{2} \dot{\vec{x}}^2 = \frac{m^{(i)}}{2} \left( \frac{\partial x_j}{\partial q_k} \dot{q}_k \right) \left( \frac{\partial x_j}{\partial q_\ell} \dot{q}_\ell \right) = \frac{m^{(i)}}{2} \frac{\partial x_j}{\partial q_k} \frac{\partial x_j}{\partial q_\ell} \dot{q}_k \dot{q}_\ell , \quad (2.3)$$

mit  $k, \ell = 1, \dots, f$  und für einen Massenpunkt  $j = 1, \dots, 3$ . Für die gesamte kinetische Energie nutzen wir wieder den kompletten Vektor  $x_j$  mit  $j = 1, \dots, 3N$  und erhalten

$$T(\vec{q}) = \left( \sum_{j, (i(j))} \frac{m^{(i)}}{2} \frac{\partial x_j}{\partial q_k} \frac{\partial x_j}{\partial q_\ell} \right) \dot{q}_k \dot{q}_\ell . \quad (2.4)$$

Wir werten  $m^{(i)}$  zusammen mit  $j$  so aus, dass die Masse zu den Koordinaten des entsprechenden Massenpunktes passt.

- Nach dem zweiten Newtonschen Axiom ist die Bewegungsgleichung des Massenpunktes  $m^{(i)}$  in einem konservativen Kraftfeld

$$m^{(i)} \ddot{x}_j = - \frac{\partial V(\vec{x})}{\partial x_j} . \quad (2.5)$$

Mithilfe der kinetischen Energie des Massenpunktes lässt sich diese Bewegungsgleichung umschreiben,

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T^{(i)}}{\partial \dot{x}_j} = \frac{d}{dt} \frac{m^{(i)}}{2} \frac{\partial \dot{x}_j^2}{\partial \dot{x}_j} = \frac{d}{dt} m^{(i)} \dot{x}_j = - \frac{\partial V(\vec{x})}{\partial x_j} . \quad (2.6)$$

Wenn wir hier die Parameter  $q_k$  einführen, dann erhalten wir

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial T^{(i)}(\vec{q})}{\partial \dot{q}_k} \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial \dot{x}_j} \right) = - \frac{\partial V(\vec{q})}{\partial q_k} \frac{\partial q_k}{\partial x_j} . \quad (2.7)$$

Wir setzen nun voraus, dass  $\partial q_j / \partial x_k$  zeitunabhängig ist und erhalten mit (2.2)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial T^{(i)}}{\partial \dot{q}_k} \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial \dot{x}_j} \right) &= \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial T^{(i)}}{\partial \dot{q}_k} \frac{\partial q_k}{\partial x_j} \right) \\ &= \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial T^{(i)}}{\partial \dot{q}_k} \right) \frac{\partial q_k}{\partial x_j} = - \frac{\partial V(\vec{q})}{\partial q_k} \frac{\partial q_k}{\partial x_j} . \end{aligned} \quad (2.8)$$

Das ist allgemein nur möglich ist wenn

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T^{(i)}(\dot{\vec{q}})}{\partial \dot{q}_k} = - \frac{\partial V(\vec{q})}{\partial q_k} . \quad (2.9)$$

Diese Bewegungsgleichungen für die Parameter  $q_k$  entspricht also (2.6), wenn die entsprechende Transformation zeitunabhängig ist.

- Im Gleichgewicht dürfen sich die  $q_k$  nicht ändern,  $\dot{q}_k = 0$ . Da die kinetische Energie  $T$  nach (2.4) eine quadratische Form in den verallgemeinerten Geschwindigkeiten  $\dot{q}_k$  ist, ist im Gleichgewicht auch

$$\frac{\partial T^{(i)}}{\partial \dot{q}_k} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial T^{(i)}(\dot{\vec{q}})}{\partial \dot{q}_k} = - \frac{\partial V(\vec{q})}{\partial q_k} = 0 . \quad (2.10)$$

Die verallgemeinerte Kraft verschwindet also im Gleichgewicht,

$$Q_k := - \frac{\partial V}{\partial q_k} . \quad (2.11)$$

- Wir definieren jetzt den Ursprung  $q_k = 0$  als Gleichgewichtslage und taylor die potentielle Energie bis zur 2. Ordnung in  $q_k$ ,

$$\begin{aligned} V(\vec{q}) &= V \Big|_{q=0} + \sum_{k=1}^f \frac{\partial V}{\partial q_k} \Big|_{q=0} q_k + \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^f \frac{\partial^2 V}{\partial q_k \partial q_\ell} \Big|_{q=0} q_k q_\ell + \mathcal{O}(q^3) \\ &=: \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^f V_{k\ell} q_k q_\ell + \mathcal{O}(q^3) , \end{aligned} \quad (2.12)$$

Analog wird die kinetische Energie nahe der Gleichgewichtslage

$$T(\dot{\vec{q}}) = \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^f \sum_{j,i(j)} m^{(i)} \left( \frac{\partial x_j}{\partial q_k} \frac{\partial x_j}{\partial q_\ell} \right) \dot{q}_k \dot{q}_\ell =: \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^f T_{k,\ell} \dot{q}_k \dot{q}_\ell . \quad (2.13)$$

- Die quadratischen Formen  $T$  und  $V$  können durch symmetrische  $(f \times f)$ -Matrizen ausgedrückt werden. Für beliebige  $\dot{\vec{q}}$  ist

$$\dot{\vec{q}}^T T \dot{\vec{q}} = \sum_{j,i(j)} m^{(i)} \frac{\partial \vec{x}_j}{\partial q_k} \dot{q}_k \frac{\partial \vec{x}_j}{\partial q_\ell} \dot{q}_\ell \geq 0 . \quad (2.14)$$

Die kinetische Energie kann nicht negativ werden,  $T$  ist eine positiv-semidefinite Matrix. Wir nehmen im folgenden an, dass  $T$  positiv definit ist. Aus (2.9) folgen dann wieder unter der Bedingung dass die Relation der Koordinaten zeitlich konstant ist,

$$\frac{d}{dt} T \dot{\vec{q}} = -V \vec{q} \quad \Rightarrow \quad T \ddot{\vec{q}} + V \vec{q} = 0 , \quad (2.15)$$

Diese Bewegungsgleichungen sind eine Verallgemeinerung der harmonischen Schwingungsgleichung im  $x$ -Raum.

## 2.2 Normalkoordinaten

Wir können also Systeme mit  $N$  Massenpunkten und komplizierten Nebenbedingungen durch parametrisierte Koordinaten  $\vec{q}$  beschreiben, in denen man die kinetische und potentielle Energie genau wie in Ortskoordinaten schreiben kann. Nachdem wir Matrizen diagonalisieren können stellt sich die Frage, ob man auch die quadratischen Formen  $T$  oder  $V$  durch eine geeignete Koordinatenwahl vereinfachen kann.

### 2.2.1 Transformation auf Normalkoordinaten

- Da  $T$  positiv definit ist, gibt es eine Matrix  $B$ , so dass

$$T = B^T B \quad (2.16)$$

gilt. Zum Beweis benutzen wir, dass sich  $T$  diagonalisieren lässt. Seien  $t_1, \dots, t_f$  die Eigenwerte, dann gibt es eine orthogonale Koordinatentransformation  $R$ , so dass

$$\begin{aligned} T &= R^T \text{diag}(t_k) R \\ &= R^T \text{diag}(\sqrt{t_k}) \text{diag}(\sqrt{t_k}) R \quad (T \text{ positiv definit}) \\ &=: B^T B. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Dabei ist  $B$  nur bis auf eine orthogonale Transformation  $S$  festgelegt, denn

$$(SB)^T SB = B^T (S^T S) B = B^T B = T. \quad (2.18)$$

Wir nutzen diese Form von  $T$  und transformieren die kinetische Energie

$$T = \frac{1}{2} \dot{\vec{q}}^T T \dot{\vec{q}} = \frac{1}{2} \dot{\vec{q}}^T B^T B \dot{\vec{q}} = \frac{1}{2} \dot{\xi}^T \dot{\xi} \quad \text{mit} \quad \dot{\xi} := B \dot{\vec{q}}. \quad (2.19)$$

- Für die potentiellen Energie invertieren wir zunächst  $B$ ,

$$\vec{q} =: \bar{B} \xi \quad \Rightarrow \quad V = \frac{1}{2} \vec{q}^T V \vec{q} = \frac{1}{2} \xi^T \bar{B}^T V \bar{B} \xi. \quad (2.20)$$

Um diese Form zu vereinfachen, können wir nach (2.18)  $B$  von links mit einer orthogonalen Matrix  $S$  multiplizieren,

$$\bar{B} = (SB')^{-1} \equiv \bar{B}' S^T. \quad (2.21)$$

Der Ausdruck für die kinetischen Energie ändert sich nicht, aber wir erhalten jetzt für die potentielle Energie

$$V = \frac{1}{2} \xi^T S \left[ (\bar{B}')^T V \bar{B}' \right] S^T \xi. \quad (2.22)$$

Mit einer geeigneten Wahl von  $S$  und den zu berechnenden Eigenwerten  $\lambda_k$  wird die potentielle Energie

$$V = \frac{1}{2} \xi^T \text{diag}(\lambda_k) \xi. \quad (2.23)$$

- Die kinetische und die potentielle Energie lassen sich also als

$$T = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^f \dot{\xi}_k^2 \quad \text{und} \quad V = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^f \lambda_k \xi_k^2 \quad (2.24)$$

schreiben. Die Bewegungsgleichungen lauten dann

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{\xi}_k} + \frac{\partial V}{\partial \xi_k} = \frac{d}{dt} \dot{\xi}_k + \lambda_k \xi_k = \ddot{\xi}_k + \lambda_k \xi_k = 0 \quad (2.25)$$

für alle  $k = 1, \dots, f$ . In den Parametern  $\xi_k$  *entkoppeln* also die Bewegungsgleichungen und beschreiben  $f$  *unabhängige* harmonische Oszillatoren. Die  $\xi_k$  heißen *Normalkoordinaten*.

## 2.2.2 Bestimmung der Normalkoordinaten

- Normalkoordinaten sind nur hilfreich, wenn wir sie für ein gegebenes System auch konstruieren können. Zunächst bestimmen wir nach Gleichung (2.20) die Eigenwerte  $\lambda_k$  über das charakteristische Polynom von  $\bar{B}^T V \bar{B}$ ,

$$\begin{aligned} \det(\bar{B}^T V \bar{B} - \lambda) &= 0 \\ \Leftrightarrow \det\left[B^T (\bar{B}^T V \bar{B} - \lambda) B\right] &= 0 \\ \Leftrightarrow \det(V - \lambda T) &= 0 \end{aligned} \quad (2.26)$$

Man sagt die  $\lambda_k$  sind auch die Eigenwerte von  $V$  *bezüglich*  $T$ ,

$$\begin{aligned} \bar{B}^T V \bar{B} &= \text{diag}(\lambda_k) \\ \Leftrightarrow V \bar{B} &= B^T \text{diag}(\lambda_k) \\ &= B^T (B \bar{B}) \text{diag}(\lambda_k) = T \bar{B} \text{diag}(\lambda_k). \end{aligned} \quad (2.27)$$

- Um die Eigenvektoren zu den Eigenwerten  $\lambda_k$  zu erhalten zerlegen wir die Matrix  $\bar{B}$  in Spaltenvektoren  $\vec{b}_k$ ,

$$\bar{B} = (\vec{b}_1, \dots, \vec{b}_f) \quad (2.28)$$

und erhalten damit aus (2.27) die Eigenwertgleichung

$$V \vec{b}_k = \lambda_k T \vec{b}_k, \quad (2.29)$$

in der also  $T$  an die Stelle der Einheitsmatrix tritt.

- Die bekannten Sätze zum Eigenwertproblem sind vollständig übertragbar, indem  $T$  als metrischer Tensor die Rolle der Einheitsmatrix übernimmt. Zum Beispiel sind die  $\vec{b}_k$  orthonormal bezüglich  $T$ , denn

$$\bar{B}^T T \bar{B} = \bar{B}^T B^T B \bar{B} = 1 \quad \Rightarrow \quad \vec{b}_k^T T \vec{b}_\ell = \delta_{k\ell}. \quad (2.30)$$

Daraus ergibt sich folgende Vorschrift für die Konstruktion der Matrix  $\bar{B}$  und für die Transformation auf Normalkoordinaten  $\vec{\xi}$ :

1. Zunächst das Eigenwertproblem  $(V - \lambda T)\vec{b} = 0$  lösen und ein vollständiges, bezüglich  $T$  orthonormales System von Eigenvektoren  $\vec{b}_k$  bestimmen,
2. danach mittels

$$\vec{q} = \sum_{k=1}^f \vec{b}_k \xi_k = \overline{B}\vec{\xi} \quad (2.31)$$

auf Normalkoordinaten transformieren.

### 2.2.3 Stabilität

- Die Lösungen der Bewegungsgleichungen (2.25) ist

$$\xi_k \propto e^{\pm i \sqrt{\lambda_k} t} . \quad (2.32)$$

Wir können also zwei Fälle unterscheiden:

1. Alle  $\lambda_k > 0$ , also  $\lambda_k =: \omega_k^2$ , dann sind die Lösungen harmonische Schwingungen,

$$\xi_k(t) = C_k \cos(\omega_k t - \delta_k) . \quad (2.33)$$

Das System ist genau dann stabil, wenn  $V$  strikt positiv ist, die Potentialfunktion in der Ruhelage also ein Minimum hat.

2. Mindestens ein  $\lambda_k \leq 0$ , dann kann  $\xi_k$  im Rahmen der betrachteten Näherung unbegrenzt wachsen und das System ist instabil.

- Im stabilen Fall ist die allgemeine Lösung der Bewegungsgleichung für das Gesamtsystem nach (2.31) und (2.33)

$$\vec{q}(t) = \sum_{k=1}^f \vec{b}_k \xi_k(t) = \sum_{k=1}^f \vec{b}_k C_k \cos(\omega_k t - \delta_k) . \quad (2.34)$$

Die  $\omega_k$  sind die Eigenfrequenzen oder *Normalfrequenzen*. Bei *Normalschwingungen* ist nur eine Normalkoordinate angeregt, zum Beispiel  $\xi_k$ , und die anderen sind in Ruhe. Dann ist

$$\vec{q}(t) = \vec{b}_k C_k \cos(\omega_k t - \delta_k) \quad (2.35)$$

ohne Summation über  $k$ . Hierzu eine Bemerkung, das System kehrt nie in seine Anfangslage zurück, wenn die  $\omega_k$  nicht in rationalen Verhältnissen zueinander stehen.

- Die Konstanten  $C_k$  und  $\delta_k$  werden wie immer durch die Anfangsbedingungen bestimmt,

$$\begin{aligned} \vec{q}_0 = \vec{q}(t=0) &= \sum_{k=1}^f \vec{b}_k C_k \cos \delta_k \\ \dot{\vec{q}}_0 = \dot{\vec{q}}(t=0) &= \sum_{k=1}^f \vec{b}_k C_k \omega_k \sin \delta_k . \end{aligned} \quad (2.36)$$

## 2.2.4 Gekoppelte Pendel

Nachdem wir die Normalkoordinaten formal eingeführt haben fehlt uns noch ein Beispiel.

- Gegeben seien zwei gleiche ebene Pendel der Länge  $l$  mit dem Abstand  $x_0$ , an denen Massenpunkte  $m$  hängen. Die Pendel seien durch eine Feder mit der Ruhelänge  $x_0$  und der Federkonstanten  $k$  aneinander gekoppelt.
- Geeignete Parameter für dieses Systems sind die Auslenkwinkel  $q_1 = \varphi_1$  und  $q_2 = \varphi_2$ . Damit ist die kinetische Energie

$$T = \frac{m}{2} (l^2 \dot{\varphi}_1^2 + l^2 \dot{\varphi}_2^2) \quad \Rightarrow \quad T = ml^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.37)$$

Die potentielle Energie setzt sich aus den Beiträgen des Schwerfelds und der Feder zusammen,

$$V = -mgl [\cos \varphi_1 + \cos \varphi_2] + \frac{k}{2} \left[ \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} - x_0 \right]^2. \quad (2.38)$$

Für kleine Auslenkungen können die  $y_j$  gegenüber den  $x_j$  vernachlässigt werden, wenn wir  $x_j = l \sin \varphi_j \approx l \varphi_j$  taylor. Mit  $\cos \varphi_j \approx 1 - \varphi_j^2/2$  wird die potentielle Energie

$$\begin{aligned} V &= -mgl \left( 2 - \frac{\varphi_1^2}{2} - \frac{\varphi_2^2}{2} \right) + \frac{k}{2} \left[ \sqrt{(x_0 + l\varphi_1 - l\varphi_2)^2} - x_0 \right]^2 \\ &\approx \frac{mgl}{2} (\varphi_1^2 + \varphi_2^2) + \frac{k}{2} l^2 (\varphi_1 - \varphi_2)^2 \\ \Leftrightarrow V &= mgl \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + kl^2 \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

- Die Gleichung  $\det(V - \lambda T) = 0$  bestimmt dann das charakteristische Polynom

$$(mgl + kl^2 - ml^2 \lambda)^2 - k^2 l^4 = 0, \quad (2.40)$$

mit den Lösungen

$$\lambda_1 = \frac{g}{l} \quad \text{und} \quad \lambda_2 = \frac{g}{l} + 2 \frac{k}{m}. \quad (2.41)$$

Die beiden entsprechend (2.30) normierten Eigenvektoren sind

$$\vec{b}_1 = \frac{1}{\sqrt{2ml}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{b}_2 = \frac{1}{\sqrt{2ml}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad (2.42)$$

d.h. die Normalschwingungen entsprechen solchen Schwingungen, bei denen die beiden Pendel entweder gleichphasig oder gegenphasig schwingen.

# Kapitel 3

## Systeme mit Nebenbedingungen

Im vorigen Kapitel haben wir gelernt, dass geeignete Koordinaten für die Freiheitsgrade eines Systems gezielt konstruieren kann. Bei der Konstruktion der Freiheitsgrade spielen Neben- oder Zwangsbedingungen eine zentrale Rolle. Wir verfolgen also weiter die Abstrahierung von Koordinaten und die Konstruktion von Bewegungsgleichungen, jetzt aber im Hinblick auf allgemeine Zwangsbedingungen.

### 3.1 Vorbereitung

#### 3.1.1 Verallgemeinerte Koordinaten

- Neben- oder *Zwangsbedingungen* können auf verschiedene Weisen formuliert werden. Oft ist es möglich, sie für  $N$  Massenpunkte und ihre Ortsvektoren  $\vec{x}_i$  durch Gleichungen der Art

$$g_i(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N, t) = 0, \quad 1 \leq i \leq r \quad (3.1)$$

auszudrücken. Hier haben wir  $r$  Bedingungen, also reduziert sich die Anzahl der Freiheitsgrade auf  $f = 3N - r$ . Wir nehmen an, dass die  $g_i$  genügend oft differenzierbar sind. Beispiele für Nebenbedingungen dieser Art sind:

- Bewegung auf einer Ebene, also  $\vec{x} \cdot \vec{n} = 0$ , wobei  $\vec{n}$  der Normalenvektor der Ebene ist.
- Bewegung auf einer Kugel, also  $|\vec{x}| - R = 0$ .

Nebenbedingungen dieses Typs heißen *holonom*. Ein Beispiel für eine *nichtholonomie* Nebenbedingung ist die Bewegung innerhalb einer Kugel, also  $|\vec{x}| \leq R$ . Bedingungen, die die Zeit explizit enthalten, heißen *rheonom*, anderenfalls *skleronom* (rheos, fließend; skleros, starr).

- Der *Konfigurationsraum* eines Systems ist der Teil des  $3N$ -dimensionalen Raums, der von den Koordinaten der  $N$  Massenpunkte erreicht werden kann. Die  $r$  Bedingungsgleichungen  $g_i$  definieren eine  $(3N - r)$ -dimensionale sogenannte Untermannigfaltigkeit im Konfigurationsraum. Dort kann die Lage des Systems durch  $f = 3N - r$  unabhängige *verallgemeinerte Koordinaten*  $q_j$  angegeben werden.
- Zum Beispiel ist der Konfigurationsraum eines freien Massenpunkts  $\mathbb{R}^3$ . Die Nebenbedingung  $|\vec{x}| = R$  definiert eine zweidimensionale Untermannigfaltigkeit, eine Kugelschale. So kann die Nebenbedingung für die Bewegung auf der Oberfläche einer Kugel mit Radius  $R$ ,  $|\vec{x}| - R = 0$ , durch

$$\vec{x} = R \cdot \begin{pmatrix} \sin \vartheta \cos \varphi \\ \sin \vartheta \sin \varphi \\ \cos \vartheta \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

mit  $0 \leq \vartheta \leq \pi$ ,  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$  angegeben werden. Die verallgemeinerten Koordinaten  $(q_1, q_2)$  sind hier die Winkel  $(\vartheta, \varphi)$ .

### 3.1.2 Lagrange-Multiplikatoren

- Unsere Beschreibung läuft darauf hinaus, Differentialgleichungen unter Nebenbedingungen zu lösen. Dafür gibt es etablierte Verfahren. Als Beispiel betrachten einen Zylinder mit einem variablen Radius  $R$  und einer variablen Höhe  $H$ . Wir wollen die Oberfläche  $A = 2\pi RH + 2\pi R^2$  als Funktion von  $R$  und  $H$  minimieren,

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial A}{\partial R} dR + \frac{\partial A}{\partial H} dH \\ &= (2\pi H + 4\pi R) dR + 2\pi R dH . \end{aligned} \quad (3.3)$$

Aufgelöst nach  $dR/dH$  erhalten wir eine Differentialgleichung für die Linie mit der minimalen Oberfläche.

- Ausserdem fordern wir ein festes Volumen  $V$ , also die holonome Nebenbedingung

$$\pi R^2 H - V = 0 . \quad (3.4)$$

Änderungen im  $R$  und  $H$  müssen diese Bedingung erhalten,

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial R} (\pi R^2 H - V) dR + \frac{\partial}{\partial H} (\pi R^2 H - V) dH \\ &= 2\pi R H dR + \pi R^2 dH . \end{aligned} \quad (3.5)$$

Aus (3.3) und (3.5) können wir die Werte für  $R$  und  $H$  bestimmen, die der minimalen Oberfläche bei konstantem Volumen entspricht. Wir können zum Beispiel zunächst  $dH$  eliminieren,

$$\begin{aligned} -\frac{2\pi RH}{\pi R^2} dR &= -\frac{2\pi H + 4\pi R}{2\pi R} dR \\ \Leftrightarrow 4\pi RH &= 2\pi RH + 4\pi R^2 \quad \Leftrightarrow R = \frac{H}{2}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

- Es gibt eine andere Methode, die sich leichter auf komplexere Systeme erweitern lässt. Sie beruht auf der Beobachtung, dass in der oben beschriebenen Rechnung  $dR$  und  $dH$  nicht bestimmt werden. Wir kombinieren die beiden Gleichungen stattdessen mit Hilfe eines unbestimmten *Lagrange-Multiplikators*  $\lambda \in \mathbb{R}$ ,

$$0 = (2\pi H + 4\pi R + \lambda 2\pi RH) dR + (2\pi R + \lambda \pi R^2) dH \quad (3.7)$$

und erhalten für allgemeines  $dH$  und  $dR$  zwei Bedingungen. Aus der ersten bestimmen wir die Hilfsgröße  $\lambda$ ,

$$2\pi R + \lambda \pi R^2 = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \lambda = -\frac{2}{R}, \quad (3.8)$$

und dann die Korrelation von  $R$  und  $H$

$$\begin{aligned} 0 &= 2\pi H + 4\pi R - \frac{2}{R} 2\pi RH \\ &= 2\pi H + 4\pi R - 4\pi H \\ \Leftrightarrow H &= 2R. \end{aligned} \quad (3.9)$$

- Diese Methode für die Suche nach Extrema von Funktionen unter Nebenbedingungen verallgemeinern wir. Für eine Funktion  $f(\vec{x})$  betrachten wir zunächst Linien mit konstantem Funktionswert, wo der Pfad senkrecht auf dem Gradienten steht oder die totale Ableitung verschwindet,

$$df = \vec{\nabla} f \cdot d\vec{x} = 0. \quad (3.10)$$

Eine holonome Nebenbedingung  $g(\vec{x}) = 0$  reduziert die Anzahl der Freiheitsgrade. Entlang unseres Pfades darf sich auch  $g(\vec{x})$  nicht ändern, also

$$dg = \vec{\nabla} g \cdot d\vec{x} = 0. \quad (3.11)$$

Zusammen spannen  $\vec{\nabla} f$  und  $\vec{\nabla} g$  eine Ebene senkrecht zu  $d\vec{x}$  auf. Um nun das Extremum von  $f(\vec{x})$  zu finden folgen wir in dieser Ebene so lange dem Gradienten  $\vec{\nabla} f$ , bis die Nebenbedingung jeder weiteren Veränderung entgegensteht, also  $\vec{\nabla} g$  in dieselbe Richtung wie  $\vec{\nabla} f$  zeigt,

$$\vec{\nabla} f + \lambda \vec{\nabla} g = 0. \quad (3.12)$$

Wir greifen eine Richtung heraus, um  $\lambda$  zu bestimmen,

$$\frac{\partial f}{\partial x_3} + \lambda \frac{\partial g}{\partial x_3} = 0. \quad (3.13)$$

Für dieses  $\lambda$  müssen dann die beiden anderen Ableitungen verschwinden,

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} + \lambda \frac{\partial g}{\partial x_j} = 0 \quad (j = 1, 2) \quad (3.14)$$

Diese beiden Bedingungen geben uns die erlaubte Koordinatenfläche. Man kann (3.12) so verstehen, dass wir so lange dem Gradienten von der zu minimierende Funktion  $f$  folgen, bis uns die holonome Rangbedingung komplett stoppt und auch keinen Richtungs-Kompromiss mehr zulässt.

- Wenn  $r$  Bedingungen  $g_k = 0$  ( $1 \leq k \leq r$ ) zu erfüllen sind, dann wird jede mit einem eigenen Lagrange-Multiplikator  $\lambda_i$  berücksichtigt. Die Bedingungen für Extrema unter Nebenbedingungen lautet

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^r \lambda_k \frac{\partial g_k}{\partial x_j} = 0 \quad (1 \leq j \leq N). \quad (3.15)$$

## 3.2 Das d’Alembertsche Prinzip

Im vorigen Kapitel haben wir die Bewegung von Teilchen unter Nebenbedingungen mit Hilfe geeigneter Koordinaten beschrieben. Die Newtonsche Mechanik und Kräfte haben hier keine Rolle gespielt. Das wird auch so bleiben, allerdings werfen wir vorher noch einen kurzen Blick auf die Verbindung zwischen Neben- oder Zwangsbedingungen und entsprechenden *Zwangskräften*.

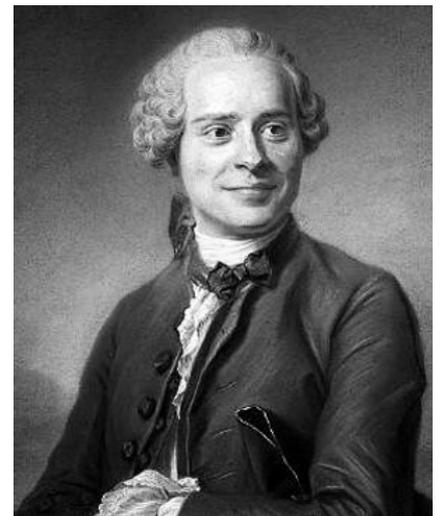
### 3.2.1 Zwangskräfte im Gleichgewicht

- Als Beispiel betrachten wir eine Kugel, die unter dem Einfluss der Schwerkraft  $\vec{F}$  reibungsfrei in einer Röhre in der  $y$ - $z$ -Ebene gleite, beschrieben durch die holonome Zwangsbedingung

$$g(y, z) = 0 \quad (3.16)$$

Ohne uns die funktionale Form der Zwangsbedingung  $g$  anzusehen, können wir ihren Effekt als Kraft formulieren: Die Tangentialkomponente der Schwerkraft  $\vec{F}$  zur Röhre verursacht die Bewegung, während die Normalkomponente durch eine Zwangskraft  $\vec{Z}$  kompensiert wird. Die Bewegung in der Röhre folgt also dem hypothetischen Gleichgewicht

$$\vec{F} + \vec{Z} = \vec{0}. \quad (3.17)$$



Jean Baptiste le Rond d’Alembert

- Wir wollen die Gleichgewichtsbedingung finden. Dazu denken wir uns eine virtuelle Verrückung  $\delta\vec{x}$  entlang der Röhre

$$\delta\vec{x} = \begin{pmatrix} \delta y \\ \delta z \end{pmatrix}. \quad (3.18)$$

Solange der Massenpunkt in der Röhre bleibt, ändert sich  $g$  wie in (3.11) nicht, also

$$0 = \vec{\nabla}g \cdot \delta\vec{x} = \frac{\partial g(y, z)}{\partial y} \delta y + \frac{\partial g(y, z)}{\partial z} \delta z. \quad (3.19)$$

Die zur virtuelle Verrückung gehörende Arbeit verschwindet genau im Gleichgewicht,

$$\delta A = (\vec{F} + \vec{Z}) \cdot \delta\vec{x} = \vec{0} \cdot \delta\vec{x} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \vec{F} \cdot \delta\vec{x} = 0 \quad (3.20)$$

Im letzten Schritt nutzen wir, dass  $\vec{Z}$  normal zur Röhre ist. Im Gleichgewicht haben wir also zwei Bedingungen

$$\vec{F} \cdot \delta\vec{x} = 0 \quad \text{und} \quad \vec{\nabla}g \cdot \delta\vec{x} = 0. \quad (3.21)$$

Wir nennen die *d'Alembertsche Prinzip*.

- Wir wissen schon, dass wir die Gleichgewichtsbedingungen (3.21) mit Hilfe eines Lagrange-Multiplikators  $\lambda$  erfüllen können,

$$\begin{aligned} 0 &= (\vec{F} + \lambda \vec{\nabla}g) \cdot \delta\vec{x} \\ &= \left( F_y + \lambda \frac{\partial g}{\partial y} \right) \delta y + \left( F_z + \lambda \frac{\partial g}{\partial z} \right) \delta z. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Wenn wir ebenfalls  $g(y, z) = 0$  erfüllen, dann erhalten wir mit (3.22) drei Gleichungen für die Unbekannten  $\lambda$ ,  $F_y$ , und  $F_z$ .

- Als Beispiel betrachten wir eine Parabel in der  $y$ - $z$ -Ebene,

$$z = y^2 \quad \Leftrightarrow \quad g(y, z) = z - y^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{\nabla}g(y, z) = \begin{pmatrix} -2y \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

Die Schwerkraft ist

$$\vec{F}(y, z) = -mg\vec{e}_z = \begin{pmatrix} 0 \\ -mg \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

Das Prinzip der virtuellen Arbeit liefert entlang des Weges

$$(\vec{F} + \lambda \vec{\nabla}g(y, z)) \cdot \delta\vec{x} = \left[ \begin{pmatrix} 0 \\ -mg \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} -2y \\ 1 \end{pmatrix} \right] \cdot \begin{pmatrix} \delta y \\ \delta z \end{pmatrix} = 0, \quad (3.25)$$

also in den beiden Komponenten

$$-2\lambda y \delta y = 0 \quad \text{und} \quad (-mg + \lambda) \delta z = 0. \quad (3.26)$$

Wenn wieder  $\delta y$  und  $\delta z$  beliebig sein dürfen, erhalten wir

$$\lambda = mg \quad \text{und} \quad y = 0. \quad (3.27)$$

In der Gleichgewichtslage mit  $y = 0$  muss wegen der Zwangsbedingung auch  $z = 0$  sein.

### 3.2.2 Dynamische Systeme

- Um Bewegungsgleichungen herleiten zu können, erweitern unsere Beschreibung auf dynamische Systeme. Gegeben seien  $N$  Massenpunkte mit den Ortsvektoren  $\vec{x}_i$ , die sich unter dem Einfluss der äußeren Kräfte  $\vec{F}_i$  bewegen. Zwangsbedingungen werden zunächst wieder durch Zwangskräfte  $\vec{Z}$  dargestellt. Nach (3.21) gilt im Gleichgewicht

$$\sum_{i=1}^N \vec{F}_i \cdot \delta \vec{x}_i = - \sum_{i=1}^N \vec{Z}_i \cdot \delta \vec{x}_i = 0. \quad (3.28)$$

- Abseits vom Gleichgewicht lauten die  $N$  Bewegungsgleichungen

$$\dot{\vec{p}}_i = \vec{F}_i + \vec{Z}_i. \quad (3.29)$$

Wir können damit die Zwangskräfte in (3.28) eliminieren, und das d'Alembertsche Prinzip wird

$$\sum_{i=1}^N (\vec{F}_i - \dot{\vec{p}}_i) \cdot \delta \vec{x}_i = \sum_{i=1}^N (\vec{F}_i - m \ddot{\vec{x}}_i) \cdot \delta \vec{x}_i = 0. \quad (3.30)$$

Die  $-\dot{\vec{p}}_i$  erscheinen als sogenannte *Trägheitskräfte*. Die Bewegung verläuft so, dass die virtuelle Arbeit der Summe von äußeren und Trägheitskräften verschwindet.

- Als Beispiel bewege sich ein Massenpunkt der Masse  $m$  als Zwangsbedingung an einem Ende einer masselosen Stange der Länge  $l$ . Sein Ort, seine Geschwindigkeit und seine Beschleunigung sind

$$\begin{aligned} \vec{x} &= \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix} = l \begin{pmatrix} \sin \varphi \\ -\cos \varphi \end{pmatrix} \\ \dot{\vec{x}} &= l \dot{\varphi} \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix} \\ \ddot{\vec{x}} &= l \ddot{\varphi} \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix} + l \dot{\varphi}^2 \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Zum Beispiel würde eine konstante Winkelgeschwindigkeit  $\dot{\varphi}$  die Trägheitskraft

$$-m \ddot{\vec{x}} = \vec{0} - ml \dot{\varphi}^2 \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \end{pmatrix} = ml \dot{\varphi}^2 \vec{x} = \frac{mv^2}{l} \frac{\vec{x}}{l}, \quad (3.32)$$

erzeugen, da  $v = |\dot{\vec{x}}| = l \dot{\varphi}$ . Das ist die Zentripetalkraft.

- Zur Beschreibung eines mathematischen Pendels fügen wir die Gewichtskraft  $\vec{F} = -mg\vec{e}_z$  hinzu. Als erstes muss die virtuelle Verrückung  $\delta\vec{x}$  die Zwangsbedingung in (3.31) erfüllen

$$\delta\vec{x} = l\delta\varphi \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \end{pmatrix}. \quad (3.33)$$

Aus dem d'Alembertschen Prinzip (3.30) mit der allgemeinen Trägheitskraft (3.31) erhalten wir

$$\begin{aligned} 0 &= \left[ -mg \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - ml\ddot{\varphi} \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \end{pmatrix} - ml\dot{\varphi}^2 \begin{pmatrix} -\sin\varphi \\ \cos\varphi \end{pmatrix} \right] \cdot \delta\vec{x} \\ &= \left[ -mg \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - ml\ddot{\varphi} \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \end{pmatrix} - ml\dot{\varphi}^2 \begin{pmatrix} -\sin\varphi \\ \cos\varphi \end{pmatrix} \right] \cdot l \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \end{pmatrix} \delta\varphi, \end{aligned} \quad (3.34)$$

oder für beliebige virtuelle Verrückung

$$\begin{aligned} 0 &= 0 - l\ddot{\varphi} \cos^2\varphi + l\dot{\varphi}^2 \sin\varphi \cos\varphi \\ 0 &= -g \sin\varphi - l\ddot{\varphi} \sin^2\varphi - l\dot{\varphi}^2 \cos\varphi \sin\varphi. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Wir kombinieren die beiden Gleichungen zu

$$0 = -g \sin\varphi - l\ddot{\varphi} \quad \Leftrightarrow \quad \ddot{\varphi} = -\frac{g}{l} \sin\varphi \approx -\frac{g}{l} \varphi. \quad (3.36)$$

Für kleine Auslenkungen  $\varphi \ll 1$  ist dies wieder die Gleichung eines harmonischen Oszillators.

### 3.2.3 Lagrange-Gleichungen erster Art

- Wir verallgemeinern jetzt wieder unsere Argumentation auf die Beschreibung mit  $3N$  Koordinaten  $x_j$  und der äußeren Kraft  $F_j$ . Das d'Alembertsche Prinzip besagt nach (3.30) für die Verrückungen  $\delta x_j$

$$\sum_{j=1}^{3N} (F_j - m^{(i)}\ddot{x}_j) \delta x_j = 0, \quad (3.37)$$

wobei wieder  $m^{(i)}$  passend zur Koordinate  $x_j$  gewählt wird. Wir nehmen  $r$  holonome Zwangsbedingungen

$$g_k(x_1, \dots, x_{3N}) = 0 \quad k = 1, \dots, r \quad (3.38)$$

an, so dass die  $\delta x_j$  analog zu (3.21) die Gleichungen

$$\sum_{j=1}^{3N} \frac{\partial g_k}{\partial x_j} \delta x_j = 0 \quad (3.39)$$

erfüllen. Die beiden Gleichungen für  $\delta x$  lassen sich durch  $r$  Lagrange-Multiplikatoren  $\lambda_k$  kombinieren,

$$\sum_{j=1}^{3N} \left( F_j - m^{(i)} \ddot{x}_j + \sum_{k=1}^r \lambda_k \frac{\partial g_k}{\partial x_j} \right) \delta x_j = 0. \quad (3.40)$$

- Die  $\lambda_k$  werden aus den ersten  $r$  Koordinaten bestimmt,

$$\sum_{k=1}^r \lambda_k \frac{\partial g_k}{\partial x_j} = -F_j + m^{(i)} \ddot{x}_j \quad j = 1, \dots, r, \quad (3.41)$$

oder in Matrix-Schreibweise,

$$\mathcal{F} \vec{\lambda} = \vec{Q} \quad \Leftrightarrow \quad \vec{\lambda} = \mathcal{F}^{-1} \vec{Q}, \quad (3.42)$$

mit den Abkürzungen

$$\mathcal{F} = (\mathcal{F}_{jk}) := \left( \frac{\partial g_k}{\partial x_j} \right) \quad \text{und} \quad \vec{Q} = (Q_j) := m^{(i)} \ddot{x}_j - F_j \quad (3.43)$$

Das lineare Gleichungssystem für die  $r$  Multiplikatoren  $\lambda_k$  ist eindeutig lösbar, solange  $\det \mathcal{F} \neq 0$  gilt.

- Diese  $\lambda_k$  werden in die verbleibenden  $3N - r$  Gleichungen eingesetzt,

$$\begin{aligned} \sum_{j=r+1}^{3N} \left( F_j - m^{(i)} \ddot{x}_j + \sum_{k=1}^r \lambda_k \frac{\partial g_k}{\partial x_j} \right) \delta x_j &= 0 \\ F_j - m^{(i)} \ddot{x}_j + \sum_{k=1}^r \lambda_k \frac{\partial g_k}{\partial x_j} &= 0. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Dies sind die *Lagrange-Gleichungen erster Art*.

- Beispiel: Eine Perle gleite reibungslos auf einem masselosen Draht, der sich um eines seiner Enden dreht und dabei die  $x$ - $y$ -Ebene überstreicht. Die Zwangsbedingung ist, dass die Perle den Draht nicht verlassen kann,

$$g(x, y) = y \cos \varphi - x \sin \varphi = 0 \quad (3.45)$$

Ohne äußeren Kräfte folgt aus dem d'Alembertschen Prinzip (3.37) mit dem einen Lagrange-Multiplikator  $\lambda$

$$-m \begin{pmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \end{pmatrix} + \lambda \vec{\nabla} g = -m \begin{pmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \end{pmatrix} = 0. \quad (3.46)$$

Der naheliegende Ansatz für die Bahn der Perle ist

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} &= r \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{pmatrix} &= \dot{r} \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix} + r \dot{\varphi} \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \end{pmatrix} &= (\ddot{r} - r \dot{\varphi}^2) \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix} + (2\dot{r}\dot{\varphi} + r\ddot{\varphi}) \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.47)$$

Wenn wir dies in (3.46) einsetzen erhalten wir

$$(\ddot{r} - r\dot{\varphi}^2) \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix} + (2\dot{r}\dot{\varphi} + r\ddot{\varphi}) \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \end{pmatrix} = \frac{\lambda}{m} \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \end{pmatrix}. \quad (3.48)$$

Die beiden vorkommenden Vektoren sind orthogonal, also erhalten wir die beiden unabhängigen Bedingungen

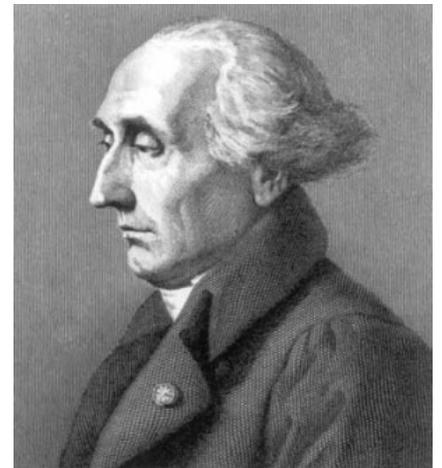
$$\ddot{r} - r\dot{\varphi}^2 = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\lambda}{m} = 2\dot{r}\dot{\varphi} + r\ddot{\varphi} \quad (3.49)$$

Die erste Gleichung ist die Bewegungsgleichung, die zweite bestimmt den Lagrange-Multiplikator. Die Zentrifugalkraft  $mr\dot{\varphi}^2$  treibt als Trägheitskraft die Perle radial nach außen.

# Kapitel 4

## Lagrange-Formulierung

An dieser Stelle verlassen wir die Newtonsche Mechanik und Kräfte. Wie im vergangenen Kapitel kann man Kräfte natürlich bestimmen, aber sie spielen bei der Berechnung von dynamischen Systemen keine Rolle mehr. Stattdessen entwickeln wir unseren Formalismus in Richtung Erhaltungsgrößen und schreiben das d'Alembertsche Prinzip anknüpfend an Kapitel 3.1.2 mit Hilfe der potentiellen and kinetischen Energie.



Joseph Louis Lagrange

### 4.1 Lagrange-Gleichungen zweiter Art

- Wir können das d'Alembert-Prinzip auf die  $f = 3N - r$  verallgemeinerten Koordinaten  $q_k$  umschreiben. Die kartesischen Koordinaten lassen sich immer noch in der Form  $x_j(\vec{q}; t)$  schreiben, und der erste Term in (3.37) wird

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{3N} F_j \delta x_j &= \sum_{j=1}^{3N} F_j \left( \sum_{k=1}^f \frac{\partial x_j}{\partial q_k} \delta q_k \right) \\ &= \sum_{k=1}^f \left( \sum_{j=1}^{3N} F_j \frac{\partial x_j}{\partial q_k} \right) \delta q_k =: \sum_{k=1}^f Q_k \delta q_k, \end{aligned} \quad (4.1)$$

wobei wir die *verallgemeinerten Kraft* über ein Potential definieren,

$$\begin{aligned} Q_k &= \sum_{j=1}^{3N} F_j(\vec{x}, t) \frac{\partial x_j}{\partial q_k} \\ &= - \sum_{j=1}^{3N} \frac{\partial V(\vec{x}, t)}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial q_k} = - \frac{\partial V(\vec{x}(\vec{q}; t); t)}{\partial q_k} \end{aligned} \quad (4.2)$$

- Der zweite Term in (3.37) wird entsprechend

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{3N} m^{(i)} \ddot{x}_j \delta x_j &= \sum_{k=1}^f \left( \sum_{j=1}^{3N} m^{(i)} \ddot{x}_j \frac{\partial x_j}{\partial q_k} \right) \delta q_k \\ &= \sum_{k=1}^f \left[ \frac{d}{dt} \left( \sum_{j=1}^{3N} m^{(i)} \dot{x}_j \frac{\partial x_j}{\partial q_k} \right) - \sum_{j=1}^{3N} m^{(i)} \dot{x}_j \frac{d}{dt} \frac{\partial x_j}{\partial q_k} \right] \delta q_k . \end{aligned} \quad (4.3)$$

Die Zeitableitung im zweiten Term können wir vereinfachen,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial x_j(\vec{q}; t)}{\partial q_k} &= \frac{\partial^2 x_j}{\partial t \partial q_k} + \sum_{\ell=1}^f \frac{\partial^2 x_j}{\partial q_k \partial q_\ell} \dot{q}_\ell \\ &= \frac{\partial}{\partial q_k} \left( \frac{\partial x_j}{\partial t} + \sum_{\ell=1}^f \frac{\partial x_j}{\partial q_\ell} \dot{q}_\ell \right) = \frac{\partial}{\partial q_k} \frac{dx_j}{dt} \equiv \frac{\partial \dot{x}_j}{\partial q_k} . \end{aligned} \quad (4.4)$$

Weiterhin nutzen wir (2.2) oder  $\partial \dot{x}_j / \partial \dot{q}_k = \partial x_j / \partial q_k$ , dann wird

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{3N} m^{(i)} \ddot{x}_j \delta x_j &= \sum_{k=1}^f \left\{ \frac{d}{dt} \left( \sum_{j=1}^{3N} m^{(i)} \dot{x}_j \frac{\partial \dot{x}_j}{\partial \dot{q}_k} \right) - \sum_{j=1}^{3N} m^{(i)} \dot{x}_j \frac{\partial \dot{x}_j}{\partial q_k} \right\} \delta q_k \\ &= \sum_{k=1}^f \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial T}{\partial q_k} \right) \delta q_k , \end{aligned} \quad (4.5)$$

mit der kinetische Energie

$$T = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{3N} m^{(i)} \dot{x}_j^2 . \quad (4.6)$$

- Nach dem d'Alembertschen Prinzip für dynamische Systeme gilt

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{j=1}^{3N} (F_j - m^{(i)} \ddot{x}_j) \delta x_j \\ &= \sum_{k=1}^f \left( -\frac{\partial V}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} + \frac{\partial T}{\partial q_k} \right) \delta q_k . \end{aligned} \quad (4.7)$$

Für beliebige  $\delta q_k$  folgen die *Lagrange-Gleichungen* (zweiter Art),

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial T}{\partial q_k} = -\frac{\partial V}{\partial q_k} . \quad (4.8)$$

Mit Hilfe der sogenannten *Lagrange-Funktion* heissen sie

$$L = T(q, \dot{q}, t) - V(q, t) \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 . \quad (4.9)$$

Sie ergeben aus Ableitungen der Lagrange-Funktion die Bewegungsgleichungen in den verallgemeinerten Koordinaten.

- Für einen Massenpunkt der Masse  $m$  im Feld einer vorgegebenen Potentialkraft ist die Lagrange-Funktion

$$L = T - V = \frac{m}{2} \sum_{j=1}^3 \dot{x}_j^2 - V. \quad (4.10)$$

Hieraus folgen die Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt} m \dot{x}_j + \frac{\partial V}{\partial x_j} = m \ddot{x}_j + \frac{\partial V}{\partial x_j} = 0. \quad (4.11)$$

- Für eine Zentralkraft  $V(r)$  in Polarkoordinaten  $(r, \varphi)$  ist die Lagrange-Funktion

$$\begin{aligned} \dot{\vec{x}}^2 &= \dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2 \\ \Rightarrow L &= \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) - V(r). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Für  $r$  und  $\varphi$  erhalten wir die beiden Lagrange-Gleichungen

$$m \ddot{r} - m r \dot{\varphi}^2 + \frac{\partial V}{\partial r} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{d}{dt} m r^2 \dot{\varphi} = 0. \quad (4.13)$$

Die erste Gleichung ist die Bewegungsgleichung, die zweite die Drehimpuls-Erhaltung.

## 4.2 Kreisel

Die Relevanz der Lagrange-Gleichungen in der Physik ist riesig. Wir illustrieren ihre Bedeutung mit Anwendungen, die unsere früheren Methoden an ihre Grenzen gebracht hätten. Die Bewegungen eines Kreisels können je nach Kraft komplex sein und als Beispiele für den neuen Formalismus dienen, um uns dann in Richtung von Erhaltungsgrößen zu führen.

### 4.2.1 Kräftefreier symmetrischer Kreisel

- Die gesamte Energie des kräftefreien Kreisels setzt sich aus der Rotation und der Translation zusammen. Wir wählen zunächst ein Bezugssystem, in dem der Schwerpunkt des Kreisels ruht. Die kinetische Energie der Rotation eines starren Körpers ist als Funktion der Winkelgeschwindigkeit

$$T_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \vec{\omega}^T \Theta \vec{\omega}, \quad (4.14)$$

wobei  $\Theta$  der Trägheitstensor ist. Wir können die Rotationsenergie als Skalar in einem beliebigen Bezugssystem auswerten, zum

Beispiel das Hauptachsensystem des Kreisels. Hier nehmen wir an, dass er symmetrisch gegenüber Drehungen um die  $x_3$ -Achse ist, also  $\Theta_1 = \Theta_2$ ,

$$\begin{aligned} \Theta &= \text{diag}(\Theta_1, \Theta_1, \Theta_3) \\ \Rightarrow L = T_{\text{rot}} &= \frac{\Theta_1}{2} (\omega_1^2 + \omega_2^2) + \frac{\Theta_3}{2} \omega_3^2. \end{aligned} \quad (4.15)$$

- Für eine Rotation eines starren Körpers sind naheliegende Koordinaten die Euler-Winkel  $(\varphi, \vartheta, \psi)$  aus den Übungen letztes Semesters. In diesen drei Winkeln wird die Winkelgeschwindigkeit

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \dot{\varphi} \sin \vartheta \sin \psi + \dot{\vartheta} \cos \psi \\ \omega_2 &= \dot{\varphi} \sin \vartheta \cos \psi - \dot{\vartheta} \sin \psi \\ \omega_3 &= \dot{\varphi} \cos \vartheta + \dot{\psi}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Die Lagrange-Funktion hat zumindest für  $\vartheta$  und  $\dot{\vartheta}$  die erwartete Form

$$L = \frac{\Theta_1}{2} (\dot{\varphi}^2 \sin^2 \vartheta + \dot{\vartheta}^2) + \frac{\Theta_3}{2} (\dot{\varphi} \cos \vartheta + \dot{\psi})^2. \quad (4.17)$$

- Da  $L$  nicht von  $\varphi$  und  $\psi$  abhängt, geben uns die Lagrange-Gleichungen hier zwei Erhaltungsgrößen

$$\begin{aligned} p_\psi &:= \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = \Theta_3 (\dot{\varphi} \cos \vartheta + \dot{\psi}) = \Theta_3 \omega_3 \\ p_\varphi &:= \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = \Theta_1 \dot{\varphi} \sin^2 \vartheta + \Theta_3 (\dot{\varphi} \cos \vartheta + \dot{\psi}) \cos \vartheta, \end{aligned} \quad (4.18)$$

die sogenannten *konjugierten Impulse*. Der erste Ausdruck ist der Drehimpuls in  $x_3$ -Richtung, der zweite der gesamte Drehimpuls. Wir können mit Hilfe dieser erhaltenen Größen  $\dot{\psi}$  ausdrücken,

$$\dot{\psi} = \frac{p_\psi}{\Theta_3} - \dot{\varphi} \cos \vartheta. \quad (4.19)$$

und analog

$$\begin{aligned} p_\varphi &= \Theta_1 \dot{\varphi} \sin^2 \vartheta + p_\psi \cos \vartheta \\ \Leftrightarrow \dot{\varphi} &= \frac{p_\varphi - p_\psi \cos \vartheta}{\Theta_1 \sin^2 \vartheta}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

- Damit wird die Lagrange-Funktion oder (erhaltene) Energie

$$\begin{aligned} L = T_{\text{rot}} &= \frac{\Theta_1}{2} \left( \frac{p_\varphi - p_\psi \cos \vartheta}{\Theta_1 \sin^2 \vartheta} \right)^2 \sin^2 \vartheta + \frac{\Theta_1}{2} \dot{\vartheta}^2 + \frac{p_\psi^2}{2\Theta_3} \\ \Leftrightarrow \frac{2}{\Theta_1} \left( T_{\text{rot}} - \frac{p_\psi^2}{2\Theta_3} \right) &= \left( \frac{p_\varphi - p_\psi \cos \vartheta}{\Theta_1 \sin^2 \vartheta} \right)^2 \sin^2 \vartheta + \dot{\vartheta}^2. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Dies ist schon eine gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung für  $\vartheta$ , schon ohne dass wir die entsprechende Lagrange-Gleichung nutzen. Allerdings können wir sie analytisch nicht lösen.

- Wir können aber die Erhaltungsgrößen und ein geeignetes Bezugssystem nutzen, um unser System besser zu verstehen. In diesem Fall hilft uns die Drehimpulserhaltung, wenn man das Inertialsystem so orientiert, dass die  $x'_3$ -Achse in Richtung des konstanten gesamten Drehimpulses  $\vec{L}'$  zeigt. Der Euler-Winkel  $\vartheta$  gibt an um welchen Winkel die Symmetrieachse des Kreisels aus der  $x'_3$ -Richtung verkippt ist,

$$L_3 = |\vec{L}'| \cos \vartheta . \quad (4.22)$$

Da sowohl  $|\vec{L}'|$  als auch  $L_3$  Erhaltungsgrößen sind, muss auch  $\vartheta$  konstant sein, also gilt für die dritte Koordinate

$$\dot{\vartheta} = 0 . \quad (4.23)$$

### 4.2.2 Kreisel im Schwerfeld

- Als Beispiel für einen Kreisel mit Potential untersuchen wir unseren symmetrischen Kreisel der Masse  $m$  im Schwerfeld der Erde. Er wird außerhalb seines Schwerpunkts, aber auf der Figurenachse unterstützt. Der Vektor vom Unterstützungspunkt zum Schwerpunkt sei  $\vec{s}$ , die nach unten zeigende Schwerkraft  $\vec{g}$  ergibt dann eine potentielle Energie und ein Drehmoment,

$$V = -m\vec{g} \cdot \vec{s} = mgs \cos \vartheta \quad \text{und} \quad \vec{M} = m (\vec{s} \times \vec{g}) . \quad (4.24)$$

- Die Lagrange-Funktion (4.17) wird also

$$L = \frac{\Theta_1}{2} (\dot{\varphi}^2 \sin^2 \vartheta + \dot{\vartheta}^2) + \frac{\Theta_3}{2} (\dot{\varphi} \cos \vartheta + \dot{\psi})^2 - mgs \cos \vartheta . \quad (4.25)$$

Wieder kommen  $\varphi$  und  $\psi$  nicht vor,  $p_\varphi$  und  $p_\psi$  bleiben also Erhaltungsgrößen. Die Energie wird

$$\begin{aligned} E &= T + V = L + 2V \\ &= \frac{\Theta_1}{2} (\dot{\varphi}^2 \sin^2 \vartheta + \dot{\vartheta}^2) + \frac{\Theta_3}{2} (\dot{\varphi} \cos \vartheta + \dot{\psi})^2 + mgs \cos \vartheta . \end{aligned} \quad (4.26)$$

Wieder sind wir am Ende unserer analytischen Möglichkeiten.

- Wir können aber unter der Annahme weiterarbeiten, dass die Gewichtskraft eine kleine Störung des freien Kreisels ist und der Kreisel außerdem schnell um seine Figurenachse rotiert. Dann ist auch der gesamte Drehimpulsvektor nahe der Figurenachse, also  $\hat{s} \approx \hat{L}'$ . Die Änderung des Drehimpulses  $\vec{L}'$  durch die Gewichtskraft ist dann

$$\vec{M} = \frac{d\vec{L}'}{dt} = m(\vec{s} \times \vec{g}) \approx \frac{mS}{L'} (\vec{L}' \times \vec{g}) \quad (4.27)$$

Das ist eine Drehung mit konstanter Winkelgeschwindigkeit. Der Drehimpulsvektor weicht also bei gleichbleibender Länge senkrecht zur Schwerkraft aus. Die Figurenachse des um sich selbst rotierenden Kreisels folgt im wesentlichen dem Drehimpulsvektor. Man kann zeigen dass je rascher der Kreisel rotiert, desto langsamer präzediert er, weil dann seine potentielle gegenüber seiner kinetischen Energie immer unwichtiger wird.

# Kapitel 5

## Extremalprinzipien

Nachdem wir die Lagrange-Funktion als zentrales Werkzeug der theoretischen Teilchenphysik abgeleitet haben, geht es nun darum, ähnliche Zugänge für andere Felder der Physik anzuleiten. Wir werden zeigen, dass sowohl das Prinzip der Stationären Wirkung als auch die Hamilton-Gleichungen äquivalent zu den Lagrange-Gleichungen sind.

### 5.1 Prinzip der stationären Wirkung

In einem ersten Schritt führen wir ein neues Konzept in die Mechanik ein, das Extremalprinzip. Wir werden zeigen, dass für eine entsprechend definierte *Wirkung* die Lagrange-Gleichungen äquivalent sind zur Aussage, dass diese Wirkung extremal ist.

#### 5.1.1 Das Fermatsche Prinzip

- Bisher haben wir mechanische Systeme differentiell beschrieben: Aus dem Zustand zur Zeit  $t$  wurde eine Änderung innerhalb der Zeit  $dt$  vorhergesagt. Jetzt betrachten wir die gesamte Bahn eines Systems.
- Gegeben sei dazu ein System mit  $f$  Freiheitsgraden und verallgemeinerten Koordinaten  $\vec{q}$ , die den Konfigurationsraum  $B \in \mathbb{R}_f$  aufspannen. Durch die Bewegung des Systems zwischen den  $t_0$  und  $t_1$  wird eine Kurve oder Bahn im Konfigurationsraum durchlaufen, die durch Bewegungsgleichungen und damit eine Lagrange-Funktion  $L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t)$  beschrieben wird.
- Wodurch unterscheidet sich dann die wirkliche Bahn  $\vec{q}(t)$  zwischen zwei festen Punkten von allen denkbaren anderen Bahnen

$\vec{q}'(t)$  mit

$$\vec{q}'(t_0) = \vec{q}'(t_0) = P_0 \quad \text{und} \quad \vec{q}'(t_1) = \vec{q}'(t_1) = P_1 . \quad (5.1)$$

- Ein Beispiel liefert das Fermatsche Prinzip der geometrischen Optik. Es besagt, dass längs des realisierten Lichtstrahls die Lichtlaufzeit extremal wird. Betrachten wir den Übergang eines Lichtstrahls vom Halbraum mit Brechungsindex  $n_1$  in den Halbraum mit Brechungsindex  $n_2$ . Der Lichtstrahl soll zwischen  $\vec{x}_1$  und  $\vec{x}_2$  in der  $x$ - $y$ -Ebene verlaufen. Der Übergang finde bei  $(0, y)$  statt. Die Lichtlaufzeit ist

$$\tau = \frac{n_1}{c} \sqrt{x_1^2 + (y - y_1)^2} + \frac{n_2}{c} \sqrt{x_2^2 + (y_2 - y)^2} , \quad (5.2)$$

weil die Lichtgeschwindigkeit durch die Brechungsindizes auf  $c/n_{1,2}$  reduziert ist. Fermats Prinzip fordert

$$\delta\tau = 0 , \quad (5.3)$$

die Lichtlaufzeit soll extremal werden. Wir können die Variation  $\delta\tau$  als Funktion der Koordinate  $y$  parametrisieren, also

$$\begin{aligned} \delta\tau &= \delta y \frac{d\tau}{dy} = 0 \\ \Leftrightarrow \frac{n_1}{c} \frac{y - y_1}{\sqrt{x^2 + (y - y_1)^2}} &= \frac{n_2}{c} \frac{y_2 - y}{\sqrt{x^2 + (y_2 - y)^2}} , \end{aligned} \quad (5.4)$$

oder, mit den Winkeln  $\alpha_{1,2}$  der Lichtstrahlen bezüglich der Normalen zur Trennfläche zwischen den beiden Halbräumen,

$$n_1 \sin \alpha_1 = n_2 \sin \alpha_2 . \quad (5.5)$$

Das ist das Brechungsgesetz, abgeleitet aus einer Extremalbedingung.

### 5.1.2 Hamiltons Prinzip

- Wir beginnen mit dem Postulat, dass entlang einer wirklichen Bahn die *Wirkung*

$$S[\vec{q}(t)] := \int_{t_0}^{t_1} L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) dt \quad (5.6)$$

extremal wird. Sie ist ein *Funktional* der Kurve  $\vec{q}(t)$ . Das *Hamiltonsche Prinzip der stationären Wirkung* lautet also

$$\delta S[\vec{q}(t)] = \delta \left[ \int_{t_0}^{t_1} L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) dt \right] = 0 . \quad (5.7)$$



William Rowan Hamilton

- Wir nutzen die *Variationsrechnung* von Leonhard Euler, die im wesentlichen totale Ableitungen und Differentiale in den Koordinaten  $q$  nutzt. Seien  $\vec{q}(t)$  die wahre und  $\vec{q}'(t) = \vec{q}(t) + \delta\vec{q}(t)$  eine verschobene Bahn. Dann gilt für kleine Variationen in führender Ordnung

$$\delta S = \int_{t_0}^{t_1} L(\vec{q} + \delta\vec{q}, \dot{\vec{q}} + \delta\dot{\vec{q}}, t) dt - \int_{t_0}^{t_1} L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) dt = 0. \quad (5.8)$$

Wir Taylorn zunächst die Lagrange-Funktion in  $\delta\vec{q}$ ,

$$\begin{aligned} L(\vec{q} + \delta\vec{q}, \dot{\vec{q}} + \delta\dot{\vec{q}}, t) &= L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) + \sum_{k=1}^f \left( \frac{\partial L}{\partial q_k} \delta q_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \delta \dot{q}_k \right) \\ \Leftrightarrow \delta S &= \int_{t_0}^{t_1} \sum_{k=1}^f \left( \frac{\partial L}{\partial q_k} \delta q_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \delta \dot{q}_k \right) dt = 0. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Partielle Integration des zweiten Terms nach der Zeit gibt

$$\int_{t_0}^{t_1} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \delta \dot{q}_k \right) dt = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \delta q_k \Big|_{t_0}^{t_1} - \int_{t_0}^{t_1} \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) \delta q_k dt. \quad (5.10)$$

Der Oberflächenterm verschwindet, wenn die Endpunkte der Bahn festgehalten werden,  $\delta q_k(t_0) = 0 = \delta q_k(t_1)$ . Daher folgt

$$\delta S = \int_{t_0}^{t_1} dt \sum_{k=1}^f \left( \frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) \delta q_k = 0. \quad (5.11)$$

Für beliebige  $\delta q_k$  wird diese Bedingung die Lagrange-Gleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0. \quad (5.12)$$

Da jeder unserer Rechenschritte reversibel ist, ist das Prinzip der stationären Wirkung *äquivalent* zu den Lagrange-Gleichungen.

- Das Wirkungsprinzip zeigt auch, dass die Lagrange-Funktion nicht eindeutig ist: Wenn man  $L$  durch die totale Zeitableitung einer beliebigen Funktion  $f(\vec{q}, t)$  ergänzt, dann ist

$$\begin{aligned} L &\rightarrow L + \frac{df(\vec{q}, t)}{dt} \\ \Rightarrow S &\rightarrow S + f(\vec{q}_1, t_1) - f(\vec{q}_0, t_0). \end{aligned} \quad (5.13)$$

Die Wirkung ändert sich also um eine Konstante, die bei der Variation verschwindet, die Bewegungsgleichungen bleiben unverändert. Das ist ein einfaches Beispiel für eine so genannte Eichinvarianz.

## 5.2 Hamilton-Funktion

Im nächsten Schritt entwickeln wir eine zweite, zu den Lagrange-Gleichungen äquivalente Methode in neuen Koordinaten. Sie führt uns auf die Hamilton-Funktion, die in der Quantenmechanik oder der Festkörperphysik eine zentrale Rolle spielt.

### 5.2.1 Phasenraum-Koordinaten

- In (4.18) haben wir ausgenutzt, dass die Lagrange-Funktion unabhängig von  $q_k$  war, um einen erhaltenen Impuls zu identifizieren. Wir definieren entsprechend, aber allgemein den zu  $q_k$  *kano-nisch konjugierte Impuls*

$$p_k := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} . \quad (5.14)$$

Seine Dimension ist durch die Bedingung festgelegt, dass  $\dot{q}_k p_k$  die Dimension Energie hat. Der zu  $q_k$  konjugierte Impuls  $p_k$  ist erhalten, wenn  $L$  nicht explizit von  $q_k$  abhängt. Solche Koordinaten heißen *zyklisch*.

- Die Zeitableitung des konjugierten Impulses ist wegen der Lagrange-Gleichungen

$$\dot{p}_k = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial L}{\partial q_k} . \quad (5.15)$$

Wenn die Transformation (5.14) von  $\dot{q}_k$  auf  $p_k$  umkehrbar ist, dann spannen  $\vec{q}$  und  $\vec{p}$  einen  $2f$ -dimensionalen Raum auf, den *Phasenraum*. Indem sich das System zeitlich verändert, werden diese  $2f$  Werte einen Bereich dieses Phasenraums überstreichen.

- Um die Bewegungsgleichungen in  $(\vec{q}, \vec{p})$  auszudrücken definieren wir zunächst ohne weitere Motivation die *Hamilton-Funktion* als sogenannte Legendre-Transformation der Lagrange-Funktion

$$H(\vec{q}, \vec{p}, t) := \dot{\vec{q}} \vec{p} - L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) , \quad (5.16)$$

ersetzen also  $\vec{q}$  durch  $\vec{p}$ . Ihre totale Zeitableitung

$$\begin{aligned}
 dH &= \sum_{k=1}^f \left( \frac{\partial H}{\partial q_k} dq_k + \frac{\partial H}{\partial p_k} dp_k \right) + \frac{\partial H}{\partial t} dt \\
 &= \sum_{k=1}^f \left( -\frac{\partial L}{\partial q_k} dq_k + \frac{\partial \dot{q}_\ell}{\partial p_k} p_\ell dp_k + \dot{q}_k dp_k - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\ell} \frac{\partial \dot{q}_\ell}{\partial p_k} dp_k \right) - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\
 &= \sum_{k=1}^f \left( -\frac{\partial L}{\partial q_k} dq_k + p_\ell d\dot{q}_\ell + \dot{q}_k dp_k - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\ell} d\dot{q}_\ell \right) - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\
 &= \sum_{k=1}^f \left( -\frac{\partial L}{\partial q_k} dq_k + \dot{q}_k dp_k \right) - \frac{\partial L}{\partial t} dt . \tag{5.17}
 \end{aligned}$$

gibt uns die drei partiellen Ableitungen der Hamilton-Funktion,

$$\frac{\partial H}{\partial q_k} = -\frac{\partial L}{\partial q_k} \equiv -\dot{p}_k \quad \frac{\partial H}{\partial p_k} = \dot{q}_k \quad \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} \tag{5.18}$$

Die erste ist äquivalent zu den Lagrange-Gleichungen, die zweite gibt uns  $\dot{q}_k$  als Funktion von  $p_k$ . Diese beiden Gleichungen heißen *Hamiltonschen kanonischen Gleichungen*.

- Als Beispiel beginnen wir mit der Lagrange-Funktion des harmonischen Oszillators in einer Dimension,

$$L(x, \dot{x}) = \frac{m\dot{x}^2}{2} - \frac{m}{2}\omega_0^2 x^2 \quad \Rightarrow \quad p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} . \tag{5.19}$$

Seine Lösung ist eine Ellipse im zweidimensionalen Phasenraum,

$$\begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ m\dot{x} \end{pmatrix} = A_0 \begin{pmatrix} \cos(\omega_0 t - \delta_0) \\ -m\omega_0 \sin(\omega_0 t - \delta_0) \end{pmatrix} . \tag{5.20}$$

Die Hamilton-Funktion ist

$$\begin{aligned}
 H(x, p) &= \dot{x}p - L(x, \dot{x}) \\
 &= \frac{p}{m} p - \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega_0^2 x^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega_0^2 x^2 . \tag{5.21}
 \end{aligned}$$

Die erste Hamilton-Gleichung definiert den Impuls

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} , \tag{5.22}$$

und die zweite gibt uns die Bewegungsgleichung

$$\dot{p} = m\ddot{x} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -m\omega_0^2 x . \tag{5.23}$$

### 5.2.2 Hamilton-Funktion und Energie

- Mit der Definition des konjugierten Impulses ist die zeitliche Änderung der Hamiltonfunktion nach (5.17)

$$\frac{dH}{dt} = (-\dot{p}_k \dot{q}_k + \dot{q}_k \dot{p}_k) + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}, \quad (5.24)$$

Wenn die Hamiltonfunktion also nicht explizit von der Zeit abhängt, dann beschreibt sie selbst eine Erhaltungsgröße.

- Anhand eines Beispiels können wir diese Erhaltungsgröße erraten: Für einen Massenpunkt  $m$  in einem Potential  $V(x_1, x_2, x_3)$  gilt

$$\begin{aligned} L &= \frac{m}{2}(\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2 + \dot{x}_3^2) - V(x_1, x_2, x_3) \\ \Rightarrow p_k &= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_k} = m\dot{x}_k \\ \Rightarrow H &= \sum_{k=1}^3 p_k \dot{x}_k - L = \sum_{k=1}^3 \frac{p_k^2}{2m} + V = E. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Die Hamiltonfunktion sollte die Gesamtenergie sein.

- Wir betrachten allgemeiner ein konservatives System von  $N$  Massenpunkten mit  $r$  Zwangsbedingungen  $g_i(\vec{x}_j) = 0$ . Diese sind in den  $f = 3N - r$  verallgemeinerten Koordinaten  $\vec{q}$  erfüllt. In der Relation zwischen den  $\vec{x}$  und  $\vec{q}$  kommt die Zeit nicht explizit vor. Für die kinetische Energie gilt wie schon in (2.14)

$$T = \left( \sum_{j=1}^N \frac{m^{(j)}}{2} \frac{\partial x_j}{\partial q_k} \frac{\partial x_j}{\partial q_\ell} \right) \dot{q}_k \dot{q}_\ell. \quad (5.26)$$

Wenn  $V$  nicht von  $\dot{q}_j$  abhängt, dann erhalten wir aus  $L = T(\vec{q}, \dot{\vec{q}}) - V(\vec{q})$  die kanonischen Impulse

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} \quad (5.27)$$

und damit die Hamiltonfunktion

$$H = p_k \dot{q}_k - L = \dot{q}_k \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} - T + V \quad (5.28)$$

Wenn also die kinetische Energie quadratisch in  $\dot{q}$  ist, dann gilt

$$\dot{q}_k \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} = 2T \quad \Rightarrow \quad H = 2T - T + V = T + V = E. \quad (5.29)$$

Wenn  $H$  nicht explizit von der Zeit abhängt, folgt die Erhaltung der Gesamtenergie. Das bedeutet dass wir über die Hamiltonfunktion Aussagen über unser System machen können, ohne die Bewegungsgleichungen zu lösen.

- Ohne Details erwähnen wir nur, dass auch für nichtkonservativer Kräfte ein Extremalprinzip zu Lagrange-Gleichungen 2. Art äquivalent ist.

### 5.2.3 Hamilton-Gleichungen und Wirkungsprinzip

- Bislang hatten wir gezeigt, dass das Prinzip der stationären Wirkung äquivalent zu den Lagrange-Gleichungen ist, und dass die Hamilton-Gleichungen äquivalent zu den Lagrange-Gleichungen sind. Zur Illustration zeigen wir jetzt die verbleibende direkte Verknüpfung zwischen der Wirkung und den Hamilton-Gleichungen.
- Als Funktional der Hamiltonfunktion lässt sich die Wirkung als

$$S = \int_{t_0}^{t_1} L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) dt = \int_{t_0}^{t_1} [\dot{\vec{q}}\vec{p} - H(\vec{q}, \vec{p}, t)] dt \quad (5.30)$$

schreiben. Ihre Variation im Phasenraum ist

$$\delta S = \int_{t_0}^{t_1} \left[ p_k \delta \dot{q}_k + \dot{q}_k \delta p_k - \frac{\partial H}{\partial q_k} \delta q_k - \frac{\partial H}{\partial p_k} \delta p_k \right] dt. \quad (5.31)$$

Der erste Term kann wieder partiell integriert werden,

$$\int_{t_0}^{t_1} p_k \delta \dot{q}_k dt = p_k \delta q_k \Big|_{t_0}^{t_1} - \int_{t_0}^{t_1} \dot{p}_k \delta q_k dt = - \int_{t_0}^{t_1} \dot{p}_k \delta q_k dt. \quad (5.32)$$

Damit erhält man analog zum Fall der Lagrangefunktion

$$0 = \delta S = \int_{t_0}^{t_1} \left[ \left( \dot{q}_k - \frac{\partial H}{\partial p_k} \right) \delta p_k - \left( \dot{p}_k + \frac{\partial H}{\partial q_k} \right) \delta q_k \right] dt. \quad (5.33)$$

Es folgen die Hamilton-Gleichungen, wenn die Variationen im Phasenraum  $\delta q_k$  und  $\delta p_k$  beliebig sind.

# Kapitel 6

## Symmetrien und Erhaltungssätze

Bei der Lösung von Bewegungsgleichungen in der Newtonschen Mechanik (Energie) oder in der Struktur der Lagrange-Gleichungen (Impuls) sind wir beiläufig auf Erhaltungsgrößen gekommen. Es wird Zeit, dass wir uns diesem Problem systematisch nähern. Dies wird es uns erlauben, über die Lagrange-Funktion Symmetrien unseres Systems und Erhaltungsgrößen zu verknüpfen.

### 6.1 Galilei-Invarianz

- Inertialsysteme haben wir als Idealfall eingeführt, in dem einfache Physik-Gesetze gelten. Die naheliegende Frage ist, ob man in einem abgeschlossenen Kasten feststellen kann, ob ein Referenzsystem ein Inertialsystem ist. Hier wird man zunächst die Bewegungsgleichungen überprüfen.

Man betrachte also  $N$  Massenpunkte  $m_i$  an den Orten  $\vec{x}_i$ , zwischen denen Potentialkräfte wirken. Die potentielle Energie des Massenpunkts  $i$  relativ zu  $j$  sei  $V_{ji}(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|)$ . Das System lässt sich durch eine Lagrange-Funktion beschreiben,

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t)}{\partial \dot{x}_{i,k}} - \frac{\partial L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t)}{\partial x_{i,k}} = 0, \quad (6.1)$$

und  $i = 1 \dots N$  und  $k = 1, 2, 3$ .

- Das Beobachtungssystem sei wie immer  $(t, \vec{x})$ , ein sicherlich existierendes Inertialsystem  $(t', \vec{x}')$ . Allgemein gilt dann

$$t' = t + \tau \quad \text{und} \quad \vec{x}' = \vec{a}(t) + R(t)\vec{x}(t). \quad (6.2)$$

Zwischen den beiden fordern wir, dass es keine Scheinkräfte gibt. Wir wissen noch, dass das bedeutet dass  $R(t)$  und  $\vec{a}(t) \equiv \vec{v}$  konstant

sind. Die Gruppe von Transformationen, die Bewegungsgleichungen invariant lassen, ist also

$$t' = t + \tau \quad \vec{x}' = \vec{a}_0 + \vec{v}t + R \cdot \vec{x} \quad \vec{a}_0 = \vec{v} = R = \text{konst.} \quad (6.3)$$

mit den zehn freien Parameter  $\tau, \vec{a}_0, \vec{v}$  und  $R$  der *Galilei-Gruppe*:

1.  $t' = t + \tau$  und  $\vec{x}' = \vec{x}$  entspricht einer Nullpunktverschiebung der Zeit. Die Invarianz bedeutet *Homogenität der Zeit*.
  2.  $t' = t$  und  $\vec{x}' = \vec{x} + \vec{a}_0$  entsprechen der Wahl des Koordinatenursprungs. Die Invarianz bedeutet *Homogenität des Raums*.
  3.  $t' = t$  und  $\vec{x}' = R \cdot \vec{x}$  ist eine Drehung der Koordinatenachsen. Die Invarianz bedeutet *Isotropie des Raums*.
  4.  $t' = t$  und  $\vec{x}' = \vec{x} + \vec{v}t$  ist eine *geradlinig-gleichförmiger Bewegung*. Eine beschleunigte Bewegung wäre feststellbar.
- Für diese Transformationen können wir die Lagrange-Funktionen auswerten,

$$\begin{aligned} \dot{\vec{x}}'^2 &= (\vec{v} + R\dot{\vec{x}})^2 = \vec{v}^2 + 2\dot{\vec{x}}^T R\vec{v} + \dot{\vec{x}}^2 \\ L &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[ m_i \dot{\vec{x}}_i'^2 - \sum_{j \neq i} V_{ji}(|\vec{x}_i' - \vec{x}_j'|) \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[ m_i \dot{\vec{x}}_i^2 - \sum_{j \neq i} V_{ji}(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|) \right] + \sum_{i=1}^N m_i \dot{\vec{x}}_i^T R\vec{v} + \frac{\vec{v}^2}{2} \sum_{i=1}^N m_i . \end{aligned} \quad (6.4)$$

In der ersten Zeile haben wir benutzt, dass die Rotation  $R$  die Länge des Vektors  $\dot{\vec{x}}$  erhält.

- Nach (5.13) kann man zur Lagrange-Funktion die totale Zeitableitung einer beliebigen Funktion  $f(\vec{x}, t)$  addieren, ohne die Physik zu ändern. Falls es also eine Funktion  $f(x, t)$  gibt, deren totale Zeitableitung die zusätzlichen Terme in (6.4) beschreibt, dann sind die Bewegungsgleichungen in beiden Systemen identisch,

$$\begin{aligned} \frac{df(\vec{x}, t)}{dt} &= \frac{\partial f(\vec{x}, t)}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \dot{\vec{x}}_i^T \cdot \vec{\nabla}_i f(\vec{x}, t) \\ &= \frac{\vec{v}^2}{2} \sum_{i=1}^N m_i + \sum_{i=1}^N \dot{\vec{x}}_i^T m_i R^T \vec{v} . \end{aligned} \quad (6.5)$$

Nach der  $\vec{x}$ -Abhängigkeit ist das (genau dann) der Fall, wenn

$$\frac{\partial f(\vec{x}, t)}{\partial t} = \frac{\vec{v}^2}{2} \sum_{i=1}^N m_i \quad \text{und} \quad \vec{\nabla}_i f(\vec{x}, t) = m_i R^T \vec{v} . \quad (6.6)$$

Damit hat (6.6) die einfache Stammfunktion

$$f(\vec{x}, t) = \frac{\vec{v}^2 t}{2} \sum_{i=1}^N m_i + \vec{v}^T \sum_{i=1}^N m_i R \vec{x}_i, \quad (6.7)$$

und wir können die Transformationen in (6.3) in eine physikalisch nicht relevante Umdefinition der Lagrange-Funktion absorbieren. Wir haben also die Eichinvarianz der klassischen Mechanik, (5.13), mit der Symmetrie gegenüber der Galilei-Gruppe verknüpft.

## 6.2 Noether-Theorem

Nachdem wir Symmetrien der Lagrange-Funktion für die Galilei-Transformationen verstanden haben, verknüpfen wir sie mit Erhaltungssätzen, von denen wir ja wissen wie sie mit den Lagrange-Gleichungen zusammenhängen.

- Wir beginnen mit infinitesimale Transformationen (6.3), die die Lagrange-Funktion nur um eine totale Zeitableitung ändern,

$$\begin{aligned} t &\rightarrow t' = t + \delta t \\ \vec{x}(t) &\rightarrow \vec{x}'(t') = \vec{x}(t) + \delta \vec{x}(t) \\ L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) &\rightarrow L(\vec{x}', \dot{\vec{x}}', t') = L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) + \frac{df(\vec{x}, t)}{dt}. \end{aligned} \quad (6.8)$$

Dann ändert sich das Wirkungsintegral zu

$$\begin{aligned} S' &= \int_{t'_0}^{t'_1} dt' L(\vec{x}', \dot{\vec{x}}', t') \\ &= S + \int_{t_0}^{t_1} dt \left[ \frac{\partial L}{\partial x_j} (\vec{x}' - \vec{x})_j + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} (\dot{\vec{x}}' - \dot{\vec{x}})_j \right] \\ &\quad + \delta t \left[ L(\vec{x}(t_1), \dot{\vec{x}}(t_1), t_1) - L(\vec{x}(t_0), \dot{\vec{x}}(t_0), t_0) \right], \end{aligned} \quad (6.9)$$

Partielle Integration und die Euler-Lagrange-Gleichungen geben wie schon einmal

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^{t_1} dt \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} (\dot{\vec{x}}' - \dot{\vec{x}})_j &= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} (\vec{x}' - \vec{x})_j \Big|_{t_0}^{t_1} - \int_{t_0}^{t_1} dt \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} (\vec{x}' - \vec{x})_j \\ &= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} (\vec{x}' - \vec{x})_j \Big|_{t_0}^{t_1} - \int_{t_0}^{t_1} dt \frac{\partial L}{\partial x_j} (\vec{x}' - \vec{x})_j \end{aligned} \quad (6.10)$$

Damit fällt das Integral weg und wir behalten die beiden Oberflächenterme

$$S' = S + \left[ \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} (\vec{x}'(t) - \vec{x}(t))_j + L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) \delta t \right]_{t_0}^{t_1}. \quad (6.11)$$

- Für die Oberflächenterme transformieren wir die Trajektorie

$$\begin{aligned} \vec{x}'(t') &= \vec{x}'(t + \delta t) = \dot{\vec{x}}(t) + \delta \dot{\vec{x}} \\ \Leftrightarrow \vec{x}'(t) &= \vec{x}(t - \delta t) + \delta \vec{x} = \vec{x}(t) - \dot{\vec{x}}(t)\delta t + \delta \vec{x}. \end{aligned} \quad (6.12)$$

und erhalten

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j}(\vec{x}' - \vec{x})_j + L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t)\delta t &= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} \delta x_j - \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} \dot{x}_j - L \right) \delta t \\ &= \vec{p} \delta \vec{x} - (\vec{p} \dot{\vec{x}} - L) \delta t \\ &= \vec{p} \delta \vec{x} - H \delta t, \end{aligned} \quad (6.13)$$

mit dem konjugierten Impuls  $p = \partial L / \partial \dot{x}$  und der Hamilton-Funktion  $H = p\dot{x} - L$ . Für die Wirkung heisst das

$$S' = S + \left[ \vec{p} \delta \vec{x} - H \delta t \right]_{t_0}^{t_1} \quad (6.14)$$

Wenn sich die Physik nicht ändert, dann muss also gelten

$$\left[ \vec{p} \delta \vec{x} - H \delta t \right]_{t_0}^{t_1} = \left[ \delta f \right]_{t_0}^{t_1} \Leftrightarrow \left[ \vec{p} \delta \vec{x} - H \delta t - \delta f \right]_{t_0}^{t_1} = 0 \quad (6.15)$$

Nach (6.6) hat die infinitesimale Verschiebung der Lagrange-Funktion für  $N$  Massenpunkte die Form

$$\delta f = \frac{\vec{v}^2}{2} \left( \sum_{i=1}^N m_i \right) \delta t + \vec{v}^T \sum_{i=1}^N m_i R \delta \vec{x}_i. \quad (6.16)$$

Weil  $t_0$  und  $t_1$  beliebige Zeitpunkte waren gilt also

$$\sum_{i=1}^N \vec{p}_i \delta \vec{x}_i - \vec{v}^T \sum_{i=1}^N m_i R \delta \vec{x}_i - H \delta t - \frac{\vec{v}^2}{2} \left( \sum_{i=1}^N m_i \right) \delta t = \text{konst} \quad (6.17)$$

- Zu welchen Erhaltungsgrößen führt daher die Symmetrie unter der Galilei-Gruppe?

1. Zeittranslationen  $t' = t + \delta t$  mit  $\delta \vec{x}_i = 0$  und  $\vec{v} = 0$  führen auf  $H = \text{konst}$ . Die Homogenität der Zeit führt also zur *Energieerhaltung*.
2. Ortstranslationen  $\vec{x}' = \vec{x} + \delta \vec{x}$  mit  $\delta t = 0$  und  $\vec{v} = 0$  bedeuten  $\vec{p}_i = \text{konst}$ , die Homogenität des Raums führt zur *Impulserhaltung*.



Emmy Noether (1882-1935)

3. Rotationen  $\delta\vec{x} = \delta\vec{\varphi} \times \vec{x}$  um den infinitesimalen Drehwinkel  $\delta\vec{\varphi}$  mit  $\delta t = 0$  und  $\vec{v} = 0$  geben uns

$$\sum_{i=1}^N \vec{p}_i \cdot (\delta\vec{\varphi} \times \vec{x}_i) = \delta\vec{\varphi} \cdot \sum_{i=1}^N (\vec{x}_i \times \vec{p}_i) = \text{konst.} \quad (6.18)$$

Da  $\delta\vec{\varphi}$  konstant ist, folgt aus der Isotropie des Raums die *Drehimpulserhaltung*.

4. Damit bleibt  $\delta t = 0$  und  $\delta\vec{x} = \vec{v}t$ , und wir erhalten für eine kleine  $\vec{v}$  aus (6.7) die Erhaltungsgröße

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \delta\vec{x}_i - \vec{v}^T \sum_{i=1}^N m_i R \vec{x}_i &= \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \vec{v}t - \vec{v}^T \sum_{i=1}^N m_i \vec{x}_i \\ &= \vec{v}^T \left( t \sum_{i=1}^N \vec{p}_i - \sum_{i=1}^N m_i \vec{x}_i \right), \\ &= -M\vec{v}^T \left( \vec{X} - t \frac{\sum_{i=1}^N \vec{p}_i}{M} \right), \end{aligned} \quad (6.19)$$

also die *geradlinig-gleichförmige Bewegung des Schwerpunkts*.

Die zehn Parameter der Galilei-Gruppe gehören also zu zehn Erhaltungsgrößen: die Energie, die Impuls- und Drehimpulsvektoren, und die Trägheitsbewegung des Schwerpunkts.

### 6.3 Lorentz-Invarianz

Wir führen das Argument, dass physikalische Gesetze in allen Inertialsystemen gelten sollen, noch weiter und werfen einen ersten Blick auf die spezielle Relativitätstheorie.

- Das allgemeine Prinzip der Invarianz physikalischer Gesetze schreiben wir jetzt als 3-teiliges Axiom oder *spezielles Relativitätsprinzip*:

A1 Gegeben ein Inertialsystem  $\Sigma$ , dann ist jedes weitere System  $\Sigma'$  genau dann ein Inertialsystem, wenn es durch Galileo-Transformationen aus  $\Sigma$  hervorgeht,

$$\Lambda : \Sigma \rightarrow \Sigma' \quad \text{mit} \quad \Lambda(\tau, \vec{a}_0, R, \vec{v}) \quad (6.20)$$

Für unser Argument betrachten wir vorwiegend  $\Lambda(\vec{v})$ .

A2 Mathematisch sollen die Transformationen  $\Lambda$  eine Gruppe bilden. Es gibt also eine Multiplikation

$$\Sigma \xrightarrow{\Lambda(\vec{v})} \Sigma' \xrightarrow{\Lambda(\vec{v}')} \Sigma'' \quad \text{mit} \quad \Sigma \xrightarrow{\Lambda(\vec{v}') \cdot \Lambda(\vec{v})} \Sigma'' \quad (6.21)$$

und ein inverses Element

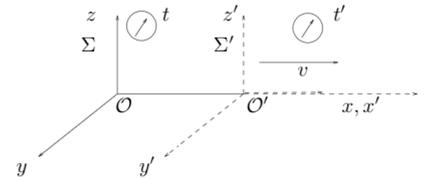
$$\Lambda(-\vec{v}) = \Lambda^{-1}(\vec{v}) \quad (6.22)$$

A3 Physikalische Gesetze gelten in jedem Inertialsystem, oder anders gesagt alle Gleichungen sind forminvariant unter  $\Lambda$ .

Wir wollen zeigen, dass die allgemeinste Form von  $\Lambda$  durch A1 and A2 eindeutig bis auf eine Konstante bestimmt wird, und zwar ohne dass wir unsere physikalische Intuition zur Form dieser Transformation einbringen. Empirische Information ist dann zur Bestimmung der Konstante erforderlich, im Einklang mit A3.

- Wir nutzen ohne Einschränkung der Allgemeinheit die sogenannte Standardkonfiguration

- $\Sigma'$  bewegt sich mit  $v$  bezüglich  $\Sigma$  in  $x_1$ -Richtung
- $t = 0$  in  $\Sigma$  entspricht  $t' = 0$  in  $\Sigma'$
- Bei  $t = 0 = t'$  fallen die Ursprünge  $O$  und  $O'$  zusammen



Standardkonfiguration

Wir beginnen wieder mit intuitiven Scheinkräften, die wir vermeiden wenn geradlinige Trajektionen im Raum auch geradlinig bleiben. Das bedeutet, dass die Transformation zwischen Inertialsystemen

$$\Lambda : (t, x_i) \longrightarrow (t', x'_i) \quad (6.23)$$

linear in  $(t, x_i)$  sein muss. Neu ist hier, dass wir nicht nur  $\vec{x}$ , sondern auch  $t$  in diese Transformation einschliessen.

- Der allgemeine lineare Ansatz für die Bewegung von  $\Sigma'$  mit  $v$  in  $x_1$ -Richtung ist

$$x'_1 = \gamma(v^2) [x_1 - v t] . \quad (6.24)$$

In die beiden orthogonalen Richtungen erzwingt die Isotropie und Homogenität gleiche Vorfaktoren,

$$x'_2 = \beta(v^2) x_2 \quad \text{und} \quad x'_3 = \beta(v^2) x_3 . \quad (6.25)$$

Die allgemeine Zeit-Transformation ist wieder linear, der Einfachheit halber nehmen wir an dass sie im Gegenzug zu (6.24) nur von  $x_1$  abhängt,

$$t' = \alpha(v^2) [t - \eta(v^2)v x_1] . \quad (6.26)$$

Die drei  $\alpha, \beta, \gamma$  sind dimensionslos, die einzige Einheit ist

$$[\eta] = \frac{1}{[v]^2} \quad (6.27)$$

- Die Parameter  $\alpha, \beta, \gamma, \eta$  hängen von  $v$  ab, wegen der Isotropie aber nur von  $v^2$ . Das Vorzeichen vor  $\eta v$  ist Konvention. Man kann die lineare Transformation zwischen Intertialsystemen als Matrix schreiben,

$$\begin{pmatrix} t' \\ x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & -\alpha\eta v & 0 & 0 \\ -v\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}. \quad (6.28)$$

Hier sehen wir noch einmal, dass wir anders als in der klassischen Mechanik in einer (3+1)-dimensionalen Raum-Zeit arbeiten.

- Wir bestimmen jetzt die Parameter mit Hilfe der Gruppen-Bedingung A2. Unserer physikalischen Interpretation verlangt  $\Lambda(-v) = \Lambda^{-1}(v)$ , also ist die inverse Transformation

$$\begin{aligned} x_1 &= \gamma(v^2) (x'_1 + vt') \\ x_{2,3} &= \beta(v^2) x'_{2,3} \\ t &= \alpha(v^2) [t' + \eta(v^2)v x'_1]. \end{aligned} \quad (6.29)$$

Kombiniert man die Transformation und ihre Inverse für  $x_2$ , dann gilt für  $\beta$

$$\begin{aligned} x_2 = \beta(v^2)x'_2 = \beta(v^2)\beta(v^2)x_2 &\Rightarrow \beta^2 = 1 \Rightarrow \beta = \pm 1 \\ \beta(v^2 = 0) = 1 &\Rightarrow \beta = 1 \end{aligned} \quad (6.30)$$

Analog erhalten wir in  $x_1$ -Richtung

$$\begin{aligned} x_1 &= \gamma (x'_1 + vt') \\ &= \gamma [\gamma(x_1 - vt) + v \alpha(t - \eta v x_1)] \\ &= \gamma (\gamma - \alpha\eta v^2) x_1 + \gamma (\alpha - \gamma) vt, \end{aligned} \quad (6.31)$$

und damit aus den beiden Koeffizienten

$$\alpha = \gamma \quad \text{und} \quad \gamma^2 = \frac{1}{1 - \eta v^2}. \quad (6.32)$$

Diese drei Bedingungen für  $\beta, \alpha$  und  $\gamma$  garantieren auch die korrekte inverse Transformation in  $x_3$  und  $t$ , und (6.28) wird

$$\begin{pmatrix} t' \\ x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma\eta v & 0 & 0 \\ -v\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}. \quad (6.33)$$

- Jetzt fehlt uns noch eine Bedingung für die dimensionsbehaftete Größe  $\eta$ . Die Verknüpfung zweier Transformationen

$$\begin{aligned} \Lambda(v) : \quad t' &= \gamma(t - \eta v x_1) & \Lambda(v') : \quad t'' &= \gamma'(t' - \eta' v' x'_1) \\ x'_1 &= \gamma(x_1 - vt) & x''_1 &= \gamma'(x'_1 - v' t') \end{aligned} \quad (6.34)$$

zu einer Transformation  $(t, x) \rightarrow (t'', x'')$  gibt uns

$$\begin{aligned} t'' &= \gamma' \gamma [t - \eta v x_1 - v' \eta' (x_1 - vt)] \equiv \gamma'' (t - \eta'' v'' x_1) \\ x_1'' &= \gamma' \gamma [x_1 - vt - v' (t - \eta \eta' x_1)] \equiv \gamma'' (x_1 - v'' t). \end{aligned} \quad (6.35)$$

Der Koeffizientenvergleich für  $t$  in der ersten Gleichung ergibt

$$\gamma'' = \gamma \gamma' (1 + \eta' v' v) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\gamma \gamma'}{\gamma''} = \frac{1}{1 + \eta' v' v}. \quad (6.36)$$

Für  $x_1$  in der ersten und  $t$  in der zweiten Gleichung erhalten wir entsprechend

$$\begin{aligned} -\gamma'' v'' \eta'' &= -\gamma \gamma' [\eta v + \eta' v'] \\ -\gamma'' v'' &= \gamma \gamma' [v + v']. \end{aligned} \quad (6.37)$$

Das bedeutet für allgemeines  $v$  und  $v'$

$$\frac{\eta}{\eta''} v + \frac{\eta'}{\eta''} v' = v + v' \quad \Leftrightarrow \quad \eta = \eta'' = \eta' \quad (6.38)$$

Damit sind auch die Koeffizienten für  $x_1$  in der ersten Gleichung identisch. Da  $\eta$  eine Einheit hat heisst das

$$\eta = \frac{1}{c^2} \quad (6.39)$$

mit einer konstanten *universellen Geschwindigkeit*  $c$ .

- Der Parameter  $\gamma$  in (6.32) ist entsprechend, mit positivem Vorzeichen wegen des Grenzfalls  $\gamma(v = 0) = 1$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (6.40)$$

Um die Physik der Transformationen besser zu verstehen, schreiben wir (6.37) mit (6.36) als

$$v'' = \gamma \gamma' \frac{v' + v}{\gamma''} = \frac{v + v'}{1 + \eta v v'} = \frac{v + v'}{1 + \frac{v v'}{c^2}} \quad (6.41)$$

Für die Interpretation von  $c$  folgt nun dass

1.  $c$  die Dimension einer Geschwindigkeit hat, es sich also um eine universelle, konstante Geschwindigkeit handelt;
2. wenn alle Geschwindigkeiten klein sind, dann gilt klassisch

$$v'' = \frac{v + v'}{1 + \frac{v v'}{c^2}} \approx v + v'. \quad (6.42)$$

3. im Grenzfall  $v' \rightarrow c$  die kombinierte Geschwindigkeit

$$v'' \rightarrow \frac{v+c}{1+\frac{cv}{c^2}} = c^2 \frac{v+c}{c^2+cv} = c \quad (6.43)$$

wird,  $c$  also die maximal mögliche Grenzgeschwindigkeit ist, und unsere Transformation nur für  $v < c$  gilt.

4. der Wert von  $c$  nicht festgelegt ist. Experimentell messen wir die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum mit  $c \approx 3 \cdot 10^8$  m/s. Die Tatsache dass sich das Licht in jedem Inertialsystem gleich schnell ausbreitet entspricht dem Axiom A3.

- Mit der skalierten Zeitkoordinate  $ct$  wird die Matrix (6.28)

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -v/c\gamma & 0 & 0 \\ -v/c\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}. \quad (6.44)$$

Diese symmetrische Form bestätigt, dass  $ct$  nichts als eine weitere Koordinate analog zu  $x_1$ ,  $x_2$  und  $x_3$  ist, wenn wir annehmen dass Koordinatentransformationen eine Gruppe bilden. Die Transformation in der Raum-Zeit nennen wir Boost. Im Grenzfall niedriger Geschwindigkeiten,  $v \ll c$ , erhalten wir die Formeln der klassischen Mechanik. Sie ist als Grenzfall in der relativistischen Beschreibung enthalten, und relativistische Effekte entkoppeln in der Ordnung  $v/c$ .

# Kapitel 7

## Phasenraum

In den vergangenen Kapiteln haben wir die Bahnen von Körpern durch Bewegungsgleichungen im Konfigurationsraum  $q$  und im Phasenraum  $(q, p)$  beschrieben. Die Bahnen von Körpern waren als Funktionen  $q(t)$  gegeben, woraus die Impulse  $p(t)$  als Funktion der Zeit folgen müssen. Die Zeitabhängigkeit der Bahnen im Phasenraum  $(q, p, t)$  betrachten wir in diesem Kapitel.

### 7.1 Kanonische Transformationen

#### 7.1.1 Erweiterter Phasenraum

- Wir erinnern uns kurz an unser System mit  $f$  Freiheitsgraden und verallgemeinerten Koordinaten  $q_j$ . Die Lagrange-Funktion  $L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t)$  muss die Lagrange-Gleichungen erfüllen. Die zu den  $q_j$  kanonisch konjugierten Impulse sind

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} . \quad (7.1)$$

Wenn sie sich nach  $\dot{q}_j$  auflösen lassen, dann können wir  $\dot{q}_j(\vec{q}, \vec{p}, t)$  durch  $p_j$  ersetzen und die Hamiltonfunktion

$$H(\vec{q}, \vec{p}, t) = p_j \dot{q}_j - L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) \quad (7.2)$$

ausschreiben. Die Bewegungsgleichungen sind dann

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} \quad \text{und} \quad \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} . \quad (7.3)$$

- Wie in (6.15) können wir außerdem das Differential der Wirkung mit Hilfe der Hamilton-Funktion schreiben,

$$dS := p_j dq_j - H dt = (p_j \dot{q}_j - H) dt . \quad (7.4)$$

Das System werde zu zwei Zeiten  $t_1, t_2 > t_1$  an zwei Punkten  $P_{1,2}$  im erweiterten Phasenraum  $(q, p, t)$  untersucht. Das Prinzip der stationären Wirkung auf Bahnen im Phasenraum gibt uns die wirkliche Bewegung des Systems durch

$$\delta \int_{P_1}^{P_2} dS = \delta \int_{P_1}^{P_2} (p_j \dot{q}_j - H) dt = 0. \quad (7.5)$$

Zum Beweis geben wir die wirkliche Bahn,  $q_j(t)$  und  $p_j(t)$ , vor und führen gestörte Vergleichsbahnen

$$\vec{q}' = \vec{q}(t) + \delta \vec{q}(t) \quad \text{und} \quad \vec{p}' = \vec{p}(t) + \delta \vec{p}(t) \quad (7.6)$$

ein, ohne die Endpunkte zu verändern,  $\delta \vec{q}(t_1) = \vec{0} = \delta \vec{q}(t_2)$ . Änderungen der Endimpulse,  $\delta \vec{p}(t_1)$  und  $\delta \vec{p}(t_2)$ , sind zugelassen. Die Variation des Wirkungs-Differentials ist dann wie in 5.2.3

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{P_1}^{P_2} [(p_j + \delta p_j)(\dot{q}_j + \delta \dot{q}_j) - H(\vec{q} + \delta \vec{q}, \vec{p} + \delta \vec{p}, t)] dt \\ &\quad - \int_{P_1}^{P_2} [p_j \dot{q}_j - H(\vec{q}, \vec{p}, t)] dt \\ &\approx \int_{P_1}^{P_2} \left[ (p_j \delta \dot{q}_j + \dot{q}_j \delta p_j) - \left( \frac{\partial H}{\partial q_j} \delta q_j + \frac{\partial H}{\partial p_j} \delta p_j \right) \right] dt \\ &= \int_{P_1}^{P_2} \left[ \left( p_j \frac{d\delta q_j}{dt} + \dot{q}_j \delta p_j \right) - \left( \frac{\partial H}{\partial q_j} \delta q_j + \frac{\partial H}{\partial p_j} \delta p_j \right) \right] dt \\ &= \int_{P_1}^{P_2} \left[ \left( -\dot{p}_j - \frac{\partial H}{\partial q_j} \right) \delta q_j + \left( \dot{q}_j - \frac{\partial H}{\partial p_j} \right) \delta p_j \right] dt, \quad (7.7) \end{aligned}$$

wo wir im letzten Schritt wieder partiell integriert haben und die Oberflächenterme verschwinden. Da  $\delta q_j$  und  $\delta p_j$  beliebig waren, ist das Prinzip der stationären Wirkung im erweiterten Phasenraum äquivalent zu den Hamilton-Gleichungen.

## 7.1.2 Kanonische Transformationen

- Mit Hilfe der Wirkung hatten wir die Freiheit abgeleitet, zur Lagrange-Funktion einen totale Zeitableitung zu addieren. Welche Transformationen lassen nun die Hamiltonschen Gleichungen invariant? Zunächst ist der Hamilton-Formalismus unabhängig von den verallgemeinerten Koordinaten, also können wir beliebige neue verallgemeinerte Koordinaten  $q'_j(\vec{q}, t)$  einführen. Wenn die Funktionaldeterminante

$$\left| \frac{\partial(q'_1, \dots, q'_f)}{\partial(q_1, \dots, q_f)} \right| \quad (7.8)$$

nicht verschwindet, können wir eindeutig auf die  $q_j(\vec{q}', t)$  zurücktransformieren. Wegen

$$p'_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'_j} = \frac{\partial q_k}{\partial \dot{q}'_j} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = a_{jk} p_k \quad (7.9)$$

induziert der Übergang zu  $q'_j$  eine lineare Transformation der konjugierten Impuls.

- Wir erinnern uns nun daran, dass wir beim Wirkungsprinzip immer ausnutzen, dass eine Transformation die Endpunkte der Bahn im erweiterten Phasenraum nicht verändert,  $\delta p_j(t_1) = 0 = \delta p_j(t_2)$ . Wir wollen diese Transformation wieder durch eine Funktion  $\Phi$  so beschreiben, dass

$$\int dS = \int dS' + (\Phi_2 - \Phi_1) = \int (dS' + d\Phi) , \quad (7.10)$$

Das heisst, dass sich die Differentiale  $dS$  aus (7.4) vor und nach einer Transformation auf  $q'_j(\vec{q}, \vec{p}, t)$  und  $p'_j(\vec{p}, \vec{q}, t)$  nur um das vollständige Differential von  $\Phi$  unterscheiden,

$$\begin{aligned} dS &= p_j dq_j - H dt \\ &= dS' + d\Phi = p'_j dq'_j - H' dt + d\Phi . \end{aligned} \quad (7.11)$$

Dann bleiben die Hamiltonschen Gleichungen erhalten und die Transformation des erweiterten Phasenraums heisst *kanonisch*. Wie konstruiert man eine solche Funktion  $\Phi$ ?

- Zum Beispiel ist die Vertauschung

$$q'_j = -p_j \quad \text{und} \quad p'_j = q_j \quad (7.12)$$

eine kanonische Transformation, denn

$$\begin{aligned} dS &= p_j dq_j - H dt = -q'_j dp'_j - H dt \\ &= p'_j dq'_j - H dt - d(p'_j q'_j) . \end{aligned} \quad (7.13)$$

Die Hamilton-Funktion gibt uns die Gesamtenergie, die sich unter unsere Koodinaten-Transformation nicht ändern soll. Das Wirkungs-Differential verschiebt sich also nur um das vollständige Differential von

$$\Phi = p'_j q'_j . \quad (7.14)$$

Das zeigt, dass  $q$  und  $p$  nach kanonischen Transformationen keineswegs die physikalische Bedeutung von Orten und Impulsen haben müssen.

### 7.1.3 Hamilton-Jacobi-Gleichung

- Wir nehmen nun an, dass  $\Phi$  von den originalen Koordinaten  $q_j$ , den neuen  $q'_j$ , und der Zeit  $t$  abhängt. Wenn eine geeigneten Wahl von  $\Phi(\vec{q}, \vec{q}', t)$

$$p_j = \frac{\partial \Phi}{\partial q_j} \quad \text{und} \quad p'_j = -\frac{\partial \Phi}{\partial q'_j} \quad (7.15)$$

garantiert, dann können wir zeigen, dass die Transformation kanonisch ist. Die einzige Bedingung ist

$$\det \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial q_j \partial q'_j} \right) \neq 0. \quad (7.16)$$



Carl Gustav Jakob Jacobi

- Für den Beweis betrachten wir das totale Differential

$$\begin{aligned} d\Phi &= \frac{\partial \Phi}{\partial t} dt + \frac{\partial \Phi}{\partial q_j} dq_j + \frac{\partial \Phi}{\partial q'_j} dq'_j \\ &= \frac{\partial \Phi}{\partial t} dt + p_j dq_j - p'_j dq'_j \\ &= \frac{\partial \Phi}{\partial t} dt + dS + H dt - p'_j dq'_j. \end{aligned} \quad (7.17)$$

Analog zu (7.11) lösen wir dies auf nach

$$dS = p'_j dq'_j - \left( H + \frac{\partial \Phi}{\partial t} \right) dt + d\Phi \quad (7.18)$$

$$= p'_j dq'_j - H' dt + d\Phi = dS' + d\Phi \quad \Leftrightarrow \quad H' = H + \frac{\partial \Phi}{\partial t}.$$

Die Transformation (7.15) mit der entsprechenden Verschiebung zu  $H'$  ist also kanonisch. Die Funktion  $\Phi$  heißt in diesem Fall *erzeugende Funktion* der Transformation.

- Die neue Hamiltonfunktion  $H'$  kann für eine geeignete Zeitanhängigkeit von  $\Phi$  verschwinden. In dem Fall gilt die *Hamilton-Jacobi-Gleichung*

$$H' = H(\vec{q}, \vec{\nabla}_q \Phi, t) + \frac{\partial \Phi(\vec{q}, \vec{q}', t)}{\partial t} = 0. \quad (7.19)$$

Für  $H' \equiv 0$  sind nach den Hamilton-Gleichungen auch

$$\dot{q}'_j = 0 = \dot{p}'_j. \quad (7.20)$$

Man nennt dies eine ‘Transformation auf Ruhe’. Diese abstrakte Herleitung verlangt offensichtlich nach Beispielen.

### 7.1.4 Harmonischer Oszillator

- Die Lagrange-Funktion des harmonischen Oszillator ist

$$L(q, \dot{q}) = \frac{m}{2} (\dot{q}^2 - \omega^2 q^2) , \quad (7.21)$$

Der kanonisch konjugierte Impuls ist  $p = m\dot{q}$ , und damit lautet die Hamilton-Funktion

$$H(q, p) = \frac{p^2}{m} - L = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2 . \quad (7.22)$$

- Wir betrachten nun die zeitunabhängige erzeugende Funktion

$$\Phi(q, q') = \frac{m}{2} \omega q^2 \cot q' . \quad (7.23)$$

Die beiden Impulse ergeben sich aus (7.15),

$$p = \frac{\partial \Phi}{\partial q} = m\omega q \cot q' \quad (7.24)$$

$$p' = -\frac{\partial \Phi}{\partial q'} = \frac{m}{2} \omega q^2 \frac{1}{\sin^2 q'} \Leftrightarrow \begin{aligned} q &= \sqrt{\frac{2p'}{m\omega}} \sin q' \\ p &= \sqrt{2p'm\omega} \cos q' , \end{aligned}$$

wobei  $(\cot x)' = -\sin^{-2} x$  verwendet wurde. Da  $\Phi(q, q')$  nicht explizit von der Zeit abhängt, ist  $H' = H$ .

- Wenn man  $q$  und  $p$  in der Hamilton-Funktion ersetzt, folgt

$$H' = H = \frac{1}{2m} 2p'm\omega \cos^2 q' + \frac{m\omega^2}{2} \frac{2p'}{m\omega} \sin^2 q' = p'\omega . \quad (7.25)$$

Da  $H'$  nicht von  $q'$  abhängt,  $q'$  also zyklisch ist, folgt

$$\begin{aligned} \dot{p}'(t) &= -\frac{\partial H'}{\partial q'} = 0 \Rightarrow p'(t) = \text{konst.} \\ \dot{q}'(t) &= \frac{\partial H'}{\partial p'} = \omega \Rightarrow q'(t) = \omega t + q'_0 . \end{aligned} \quad (7.26)$$

In den gestrichenen Koordinaten ist das System nicht mehr oszillierend, sondern eine lineare Bewegung mit konstantem Impuls und Geschwindigkeit.

- Setzt man diese Lösung in (7.24) ein, dann folgt

$$q(t) = \sqrt{\frac{2p'}{m\omega}} \sin(\omega t + q'_0) \quad (7.27)$$

Die beiden neuen Koordinaten beschreiben die Freiheitsgrade des harmonischen Oszillators,  $q'$  ist das zeitabhängige Argument der Schwingung und  $p'$  ist die (konstante) Amplitude.

### 7.1.5 Bewegung des freien Massenpunkts

- Als weiteres Beispiel betrachten wir die kräftefreie Bewegung eines Massenpunkts  $m$  mit kartesischen Koordinaten  $q_j = x_j$ ,

$$L = \frac{m}{2} \dot{\vec{q}}^2 \quad \text{und} \quad H = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 = \frac{1}{2m} \left( \frac{\partial \Phi}{\partial q_j} \right)^2. \quad (7.28)$$

In diesem Fall wollen wir das System so transformieren, dass die Hamilton-Funktion verschwindet. Dann wird die gesamte Information über unser System und seine Zeitentwicklung in der erzeugenden Funktion  $\Phi$  stecken. Die Hamilton-Jacobi-Gleichung (7.19) lautet für  $H' = 0$

$$\frac{1}{2m} \left[ \left( \frac{\partial \Phi}{\partial q_1} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Phi}{\partial q_2} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Phi}{\partial q_3} \right)^2 \right] + \frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0. \quad (7.29)$$

Zu ihrer Lösung verwenden wir den Ansatz

$$\Phi(\vec{q}, \vec{q}', t) = q'_1 q_1 + q'_2 q_2 + q'_3 q_3 - Et = \vec{q}' \cdot \vec{q} - Et \quad (7.30)$$

mit einer Konstanten  $E$ . Der Ansatz erfüllt (7.16), denn

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial q_j \partial q'_j} = \frac{\partial q'_j}{\partial q'_j} = \delta_{ij}. \quad (7.31)$$

- Die Hamilton-Jacobi-Gleichung wird damit

$$\frac{1}{2m} \left[ (q'_1)^2 + (q'_2)^2 + (q'_3)^2 \right] - E = 0 \quad \Leftrightarrow \quad E = \frac{\vec{q}'^2}{2m} \quad (7.32)$$

$E$  ist also die Energie. Die konjugierten Impulse erhalten wir aus der erzeugenden Funktion nach (7.15)

$$\begin{aligned} \Phi = \vec{q}' \cdot \vec{q} - \frac{\vec{q}'^2}{2m} t &\Rightarrow p_j = \frac{\partial \Phi}{\partial q_j} = q'_j \\ p'_j = - \frac{\partial \Phi}{\partial q'_j} &= -q_j + \frac{p_j}{m} t. \end{aligned} \quad (7.33)$$

Aus den Bedingungen  $\dot{q}'_j = 0 = \dot{p}'_j$  folgt dass  $p_j$  erhalten ist, und wie erwartet ist die Bewegungsgleichung in den originalen Koordinaten

$$\vec{q} = \frac{\vec{p}}{m} t + \text{konst.} \quad (7.34)$$

## 7.2 Lösung der Hamilton-Jacobi-Gleichung

- Im Raum  $(\vec{q}, t)$  seien  $\vec{q}_0$  die Koordinaten des Systems zum Zeitpunkt  $t_0$ . Weiterhin sei  $\Phi$  eine beliebige Funktion der Koordinaten

$\vec{q}_0$ , die noch von  $f$  weiteren Parametern  $q'_j$  abhängen und für die die Unabhängigkeitsrelation

$$\det \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial q_{0,i} \partial q'_j} \right) \neq 0 \quad (7.35)$$

gelte. Orte und Impulse zur Zeit  $t_0$  sind also

$$\vec{q}(t_0) = \vec{q}_0 \quad \text{und} \quad \vec{p}(t_0) = \vec{\nabla}_q \Phi \Big|_{q=q_0} . \quad (7.36)$$

Wir suchen die Bewegung des Systems, die zur Zeit  $t_0$  an  $\vec{q}_0$  mit den Impulsen  $\vec{p}_0$  beginnt. Sie ist durch Integration der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (7.3) gegeben und ordnet jedem Punkt  $\vec{q}_0$  eine Bahn  $\vec{q}(t)$  zu.

- Motiviert durch (7.10) wählen wir den Ansatz

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{q}, \vec{q}', t) &= \Phi_0(\vec{q}_0, \vec{q}') + \int_{t_0}^t dt' L(\vec{q}(t'), \dot{\vec{q}}(t'), t') \\ &= \Phi_0(\vec{q}_0, \vec{q}') + \int_{t_0}^t dt' [p\dot{q} - H] . \end{aligned} \quad (7.37)$$

Die erzeugende Funktion  $\Phi$  ist dann eine beliebigen Funktion  $\Phi_0$  am Ort  $q_0$ , vermehrt um das Wirkungsintegral längs der Bahn von  $q_0$  nach  $q$ . Dieser Ansatz wird als kleine Variation

$$\begin{aligned} \delta\Phi &= \frac{\partial\Phi_0}{\partial q_{j0}} \delta q_{j0} + p_j \delta q_j - p_{j0} \delta q_{j0} - H \delta t \\ &= p_j \delta q_j - H \delta t = \frac{\partial\Phi}{\partial q_j} \delta q_j + \frac{\partial\Phi}{\partial t} \delta t . \end{aligned} \quad (7.38)$$

Im zweiten Schritt haben wir  $\partial\Phi/\partial q_{i0} = p_{i0}$  verwendet. Unser Ansatz erfüllt also

$$p_j = \frac{\partial\Phi}{\partial q_j} \quad \text{und} \quad \frac{\partial\Phi}{\partial t} + H = 0 , \quad (7.39)$$

also auch die Hamilton-Jacobi-Gleichung.

- Mit unserem Ansatz (7.37) können wir also eine allgemeine Lösung für die Hamilton-Jacobi-Gleichung konstruieren und damit ein mechanische System auf Ruhe transformieren. Dieses Verfahren wird uns in der Quantenmechanik und der Pfadintegral-Methode wieder begegnen.

### 7.3 Liouvillescher Satz

Zum Abschluss diskutieren wir noch eine Eigenschaft des Phasenraums, die in der statistischen Physik, der Quantenmechanik, und der Quantenfeldtheorie wichtig werden.

- Gegeben sei ein Ensemble von Systemen, deren Bahnen bei  $t = t_0$  einen Bereich  $\sigma_0$  des Phasenraums überdecken. Der Satz von Liouville besagt, dass das Volumen des überdeckten Phasenraums konstant bleibt,

$$\text{Volumen}[\sigma(t)] = \text{konst} \quad (7.40)$$

oder in Form des Integralmaßes

$$\int_{\sigma(t)} d\vec{q} d\vec{p} = \text{konst} . \quad (7.41)$$

- Zum Beweis gehen wir in zwei Schritten vor: Erstens wissen wir, dass sich jedes mechanische System durch eine geeignete kanonische Transformation auf Ruhe transformieren lässt ( $\dot{q} = 0 = \dot{p}$ ). Auf diese Weise lässt sich eine Schar von Trajektorien im erweiterten Phasenraum in ein Geradenbündel transformieren, das parallel zur Zeitachse verläuft. Dieses Geradenbündel schließt offensichtlich ein festes Phasenraumvolumen ein.
- Dabei könnte aber die kanonische Transformation das Phasenraumvolumen verändert haben. Das wird dadurch verhindert, dass bei kanonischen Transformationen  $(q, p, t) \rightarrow (q', p', t)$  die Funktionaldeterminante immer gleich eins ist,

$$\left| \frac{\partial(\vec{q}, \vec{p})}{\partial(\vec{q}', \vec{p}')} \right| = 1 , \quad (7.42)$$

was wir hier ohne Beweis verwenden. Für den freien Massenpunkt kann man dies aber explizit sehen. Es bedeutet genau, dass kanonische Transformationen Volumenelemente im Phasenraum konstant lassen. Wir können uns das Verhalten von einem System im Phasenraum also vorstellen wie eine inkompressible Flüssigkeit im physikalischen Raum.

# Kapitel 8

## Stabilität und Chaos

Bislang sind wir implizit davon ausgegangen, dass uns die Kenntnis des Systems zu einem gegebenen Zeitpunkt zu einem Verständnis des Systems zu späteren Zeiten verhilft. Das muss nicht der Fall sein, und man kann die Systeme, für die dies gilt durch ihre Stabilität charakterisieren. In diesem Kapitel werden wir Systeme im Phasenraum analysieren und dabei verschiedene Muster finden. Chaotische Systeme zeichnen sich dadurch aus, dass man Kenntnis des Systems zu einem Zeitpunkt nicht nutzen kann, um Vorhersagen bei späteren Zeiten zu machen.

### 8.1 Stabilität

Nicht-konservative Systeme heißen *dissipativ*. Wir wissen schon, dass sie Energie verlieren, indem sie auf irgendeine Weise an ihre Umgebung oder an andere Systeme ankoppeln. Wir wollen untersuchen, ob und wann bei kritischen Werten dieser Kopplung wesentliche Änderungen im Verhalten des Systems auftreten.

#### 8.1.1 Bewegung in der Nähe des Gleichgewichts

- Der *Phasenfluss* eines Systems beschreibt die Gesamtheit der Trajektorien, die durch alle möglichen Anfangsbedingungen und Kopplungsparameter erlaubt werden. Die Frage ist ob es kritische Werte der Kopplung gibt, bei denen sich die Eigenschaften des Phasenflusses wesentlich ändern.
- Wir gehen von Bewegungsgleichungen der Form

$$\dot{\vec{z}} = \vec{F}(\vec{z}) \quad (8.1)$$

aus. Wir hatten im ersten Semester gesehen, dass sich Bewegungsgleichungen zweiter Ordnung immer in diese Form bringen lassen, zum Beispiel für den gedämpften harmonischen Oszillator

$$\ddot{x} + 2\lambda\dot{x} + \omega^2 x = 0. \quad (8.2)$$

Wir führen  $\vec{z} := (x, \dot{x})$  ein und erhalten eine Kombination der Definition und der Bewegungsgleichung

$$\begin{pmatrix} \dot{z}_1 \\ \dot{z}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_2 \\ -2\lambda z_2 - \omega^2 z_1 \end{pmatrix}. \quad (8.3)$$

Die Gleichgewichtslage  $\vec{z}_0$  ist durch  $\vec{F}(\vec{z}_0) = 0$  bestimmt. Solche Punkte heißen auch *singuläre* oder *kritische* Punkte von  $\vec{F}$ . Um sie kann man taylornd und erhält die linearisierte Form von (8.1)

$$\dot{\vec{z}} = \vec{F}(\vec{z}_0) + \left. \frac{\partial \vec{F}}{\partial z_j} \right|_{\vec{z}=\vec{z}_0} (\vec{z} - \vec{z}_0)_j + \mathcal{O}((\vec{z} - \vec{z}_0)^2) \quad (8.4)$$

- Im dynamischen Fall sei  $\vec{\zeta}(t)$  eine Lösungskurve unserer Bewegungsgleichung und  $\vec{y}(t) := \vec{z}(t) - \vec{\zeta}(t)$ , dann ist

$$\begin{aligned} \dot{\vec{y}} + \dot{\vec{\zeta}} &= \vec{F}(\vec{y} + \vec{\zeta}, t) \\ \Leftrightarrow \dot{\vec{y}} &= -\dot{\vec{\zeta}} + \vec{F}(\vec{y} + \vec{\zeta}, t) \\ &= -\vec{F}(\vec{\zeta}, t) + \vec{F}(\vec{y} + \vec{\zeta}, t) = \left. \frac{\partial \vec{F}}{\partial z_j} \right|_{\vec{z}=\vec{\zeta}} y_j + \dots \end{aligned} \quad (8.5)$$

In der Umgebung einer Lösungskurve  $\vec{\zeta}$  hat die Bewegungsgleichung also in die Form

$$\dot{\vec{y}} = A \cdot \vec{y} \quad \text{mit} \quad A_{ij} = \left. \frac{\partial F_i}{\partial z_j} \right|_{\vec{z}=\vec{\zeta}}, \quad (8.6)$$

mit der Lösung

$$\vec{y}(t) = \exp [A(t - t_0)] \cdot \vec{y}_0. \quad (8.7)$$

Die Exponentialfunktion einer Matrix  $A$  definiert man über ihre Taylorreihe. Wenn  $A$  in Diagonalform die Eigenwerte  $\alpha_i$  hat, dann ist auch  $\exp[A(t - t_0)]$  diagonal, mit den Eigenwerten  $\exp[\alpha_i(t - t_0)]$ . Sie heißen *kritische Exponenten* des Vektorfeldes  $\vec{F}$  entlang der Lösungskurve  $\vec{\zeta}$ .

- Als Beispiel betrachten wir ein ebenes Pendel, also

$$\ddot{x} = -\omega^2 x, \quad (8.8)$$

für kleine Auslenkungen. Mit  $y_1 = x$  und  $y_2 = \dot{x}$  ist

$$\begin{pmatrix} \dot{y}_1 \\ \dot{y}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_2 \\ -\omega^2 y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\omega^2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} \equiv A \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}. \quad (8.9)$$

Aus dem charakteristischen Polynom  $\alpha^2 + \omega^2 = 0$  erhalten wir die Eigenwerte  $\alpha_{1,2} = \pm i\omega$  von  $A$ . Beide kritische Exponenten sind imaginär und beschreiben daher Schwingungen des Pendels und nicht ein exponentielles Weglaufen aus dem Gleichgewicht.

- Mit Reibung wird die Bewegungsgleichung des Pendels

$$\ddot{x} + 2\lambda\dot{x} + \omega^2 x = 0. \quad (8.10)$$

Mit derselben Definition von  $y_{1,2}$  folgt

$$\begin{pmatrix} \dot{y}_1 \\ \dot{y}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_2 \\ -2\lambda y_2 - \omega^2 y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\omega^2 & -2\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} \equiv A \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}. \quad (8.11)$$

Das charakteristische Polynom gibt uns die Eigenwerte

$$\begin{aligned} 0 &= -\alpha(-\alpha - 2\lambda) + \omega^2 = \alpha^2 + 2\lambda\alpha + \omega^2 \\ \Leftrightarrow \alpha_{1,2} &= -\lambda \pm i\sqrt{\omega^2 - \lambda^2}. \end{aligned} \quad (8.12)$$

Nur für  $\lambda > 0$  und  $t \rightarrow \infty$  läuft das System ins Gleichgewicht  $x = 0$ , während es sich für  $\lambda < 0$  exponentiell vom Gleichgewicht weg bewegt.

## 8.1.2 Asymmetrischer Kreisel

- Als weiteres Beispiel nutzen wir die Kreiselbewegung in drei Dimensionen. Im Inertialsystem  $\vec{x}$  bewirke auf den  $i$ -ten Massenpunkt die äußere Kraft ein Drehmoment

$$\vec{M}' = \frac{d\vec{L}'}{dt} \quad (8.13)$$

Das kreiselfeste System  $\vec{x}$  rotiert relativ zum Inertialsystem, und als Vektoren transformieren  $\vec{M}' = R\vec{M}$  und  $\vec{L}' = R\vec{L}$ . Mit der Winkelgeschwindigkeit  $\vec{\omega}$  der Rotation gilt

$$\vec{M}' = \frac{d}{dt}\vec{L}' = R\left(\dot{\vec{L}} + \vec{\omega} \times \vec{L}\right) = R\vec{M}, \quad (8.14)$$

und mit der Definition des Trägheitstensors erhalten wir die *Euler-Gleichungen*

$$\vec{L} = \Theta\vec{\omega} \quad \Rightarrow \quad \vec{M} = \dot{\vec{L}} + \vec{\omega} \times \vec{L} = \Theta\dot{\vec{\omega}} + \vec{\omega} \times (\Theta\vec{\omega}). \quad (8.15)$$

Im Hauptachsensystem mit den Eigenwerten  $0 < \Theta_1 < \Theta_2 < \Theta_3$  nehmen wir an, dass sich der Kreisel kräftefrei bewegt,  $\vec{M} = 0$ . Mit den Definitionen  $z_i = \omega_i$  und  $\dot{\omega}_i = \dot{z}_i = F_i$  erhalten wir

$$\begin{aligned} 0 = \Theta_i F_i + \epsilon_{ijk} z_j \Theta_k z_k &\Leftrightarrow F_1 = -z_2 z_3 \frac{\Theta_3 - \Theta_2}{\Theta_1} \\ F_2 &= -z_1 z_3 \frac{\Theta_1 - \Theta_3}{\Theta_2} \\ F_3 &= -z_1 z_2 \frac{\Theta_2 - \Theta_1}{\Theta_3}. \end{aligned} \quad (8.16)$$

Die Bewegungsgleichung ist dann durch die Ableitungsmatrix aus (8.6) beschrieben

$$A = \left( \frac{\partial F_i}{\partial z_j} \right) = - \begin{pmatrix} 0 & \frac{\Theta_3 - \Theta_2}{\Theta_1} z_3 & \frac{\Theta_3 - \Theta_2}{\Theta_1} z_2 \\ \frac{\Theta_1 - \Theta_3}{\Theta_2} z_3 & 0 & \frac{\Theta_1 - \Theta_3}{\Theta_2} z_1 \\ \frac{\Theta_2 - \Theta_1}{\Theta_3} z_2 & \frac{\Theta_2 - \Theta_1}{\Theta_3} z_1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.17)$$

- Die drei Gleichgewichtslagen des Systems sind durch die Bedingung  $F_i = 0$  für (8.16) gegeben,

$$\vec{z}_{0,1} = \begin{pmatrix} \omega \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{z}_{0,2} = \begin{pmatrix} 0 \\ \omega \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{z}_{0,3} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega \end{pmatrix}, \quad (8.18)$$

wobei  $\omega$  jeweils eine beliebige Konstante ist. Um jede von ihnen können wir taylor. Zum Beispiel um  $\vec{z}_{0,1}$  erhalten wir nach (8.6)

$$\dot{\vec{y}} = A \cdot \vec{y} = - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\Theta_1 - \Theta_3}{\Theta_2} \omega \\ 0 & \frac{\Theta_2 - \Theta_1}{\Theta_3} \omega & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}. \quad (8.19)$$

Die charakteristischen Exponenten zur Gleichgewichtslage  $\vec{x}_{0,1}$  ergeben sich aus  $\det(A - \alpha_{1,i} I) = 0$ , also

$$\alpha_{1,i} \left( \alpha_{1,i}^2 - \omega^2 \frac{\Theta_1 - \Theta_3}{\Theta_2} \frac{\Theta_2 - \Theta_1}{\Theta_3} \right) = 0 \quad (8.20)$$

$$\Rightarrow \alpha_{1,1} = 0 \quad \alpha_{1,2} = -\alpha_{1,3} = \omega \left[ \frac{(\Theta_1 - \Theta_3)(\Theta_2 - \Theta_1)}{\Theta_2 \Theta_3} \right]^{1/2}.$$

- Durch zyklische Vertauschung findet man ebenfalls

$$\begin{aligned} \alpha_{2,1} = 0 \quad \alpha_{2,2} = -\alpha_{2,3} &= \omega \left[ \frac{(\Theta_2 - \Theta_1)(\Theta_3 - \Theta_2)}{\Theta_3 \Theta_1} \right]^{1/2} \\ \alpha_{3,1} = 0 \quad \alpha_{3,2} = -\alpha_{3,3} &= \omega \left[ \frac{(\Theta_3 - \Theta_2)(\Theta_1 - \Theta_3)}{\Theta_1 \Theta_2} \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (8.21)$$

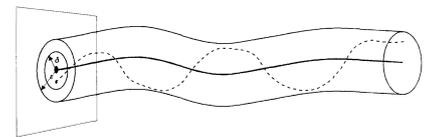
Nur die Eigenwerte  $\alpha_{2,2}$  und  $\alpha_{2,3}$  sind reell, die Bewegung des Kreisels um die Hauptachse mit dem mittleren Eigenwert entspricht also keiner Rotation. Insbesondere ist  $\alpha_{2,2}$  positiv, die Drehungen des kräftefreien, asymmetrischen Kreisels um die Achse mit dem *mittleren* Hauptträgheitsmoment sind instabil.

### 8.1.3 Sätze zur Stabilität

- Diese Überlegungen motivieren die folgenden Definitionen:

makeindex theorie2.idx: gave an error

1. Ein Punkt  $\vec{z}_0$  auf der Lösungskurve eines Systems heißt *Liapunov-stabil*, wenn zu jeder Umgebung  $U$  von  $\vec{z}_0$  eine Umgebung  $V$  von  $\vec{z}_0$  existiert so, dass die Lösungskurve, die zur Zeit  $t = 0$  durch  $V$  geht, für alle  $t \geq 0$  in  $U$  liegt. Mathematisch formuliert:  $\vec{z} \in V : \zeta_{\vec{z}}(t) \in U (t \geq 0)$ .
2. Der Punkt  $\vec{z}_0$  heißt *asymptotisch stabil*, wenn es zu  $\vec{z}_0$  eine Umgebung  $U$  gibt so, dass die Lösungskurve durch ein beliebiges  $\vec{z} \in U$  für  $t \rightarrow \infty$  nach  $\vec{z}_0$  läuft. Ein asymptotisch stabiler Punkt ist auch Liapunov-stabil.



Graphische Darstellung der Liapunov-Stabilität. Die Lösungskurve, die zur Zeit  $t = 0$  durch  $V$  (dargestellt durch den Kreis mit Radius  $\delta$ ) geht, bleibt für alle  $t \geq 0$  in  $U$  (dargestellt durch den Kreis mit Radius  $\epsilon$ ).

- Folgende Sätze beschreiben die Stabilität:

1. Sei  $\vec{z}_0$  ein Gleichgewichtspunkt von  $\vec{F}$ , ferner sei  $\Re(\alpha_i) < 0$  für alle  $\alpha_i$ , dann existiert eine Umgebung  $U$  von  $\vec{z}_0$  so, dass der Fluss dort für alle positiven Zeiten definiert ist. Weiterhin gibt es ein  $c > 0$  mit  $|\Re(\alpha_i)| > c$  und ein  $d \in \mathbb{R}$  so, dass für alle  $\vec{z} \in U$  und alle  $t \geq 0$  gilt

$$\left| \zeta_{\vec{z}} \right| \leq d e^{-ct} \left| \vec{z} - \vec{z}_0 \right| \tag{8.22}$$

(exponentielle, gleichmäßige Konvergenz nach  $\vec{z}_0$ ).

2. Wenn  $\vec{z}_0$  stabil ist, hat keiner der Eigenwerte von  $A$  einen positiven Realteil.

### 8.1.4 Attraktoren und van-der-Pol-Gleichung

- *Attraktoren* sind Bereiche des Phasenraums, zu denen Lösungskurven laufen. Zunächst verallgemeinern wir den gedämpften harmonische Oszillator dadurch, dass die Dämpfungskonstante von der Amplitude abhängt,

$$\ddot{x}(t) + 2\lambda(x)\dot{x}(t) + \omega^2 x(t) = 0 . \tag{8.23}$$

Wir erinnern uns, dass das System nur für  $\lambda > 0$  für  $t \rightarrow \infty$  ins Gleichgewicht läuft. Für die spezielle Form

$$\lambda(x) = \lambda_0 \left(1 - \frac{x^2}{x_0^2}\right) \quad \text{mit } \lambda_0 > 0 \quad (8.24)$$

wird für  $|x| < x_0$  der Oszillator gedämpft, wobei der Reibungsterm von der Amplitude abhängt. Für  $|x| > x_0$  hingegen wird der Oszillator angetrieben.

- Die Bewegungsgleichung kann wieder auf eine Differentialgleichung erster Ordnung transformiert werden. Mit  $(z_1, z_2) = (x, \dot{x})$  ergibt sich

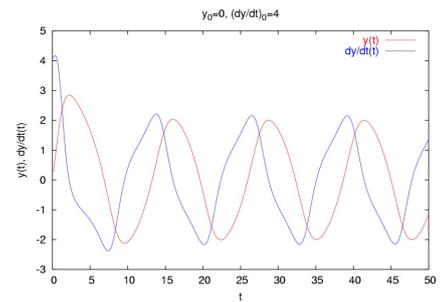
$$\begin{pmatrix} \dot{z}_1 \\ \dot{z}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_2 \\ 2\lambda_0 \left(\frac{z_1^2}{x_0^2} - 1\right) z_2 - \omega^2 z_1 \end{pmatrix}. \quad (8.25)$$

Die einzige Gleichgewichtslage ist  $\vec{z}_0 = (0, 0)$ . Entwicklung um das Gleichgewicht ergibt die Matrix

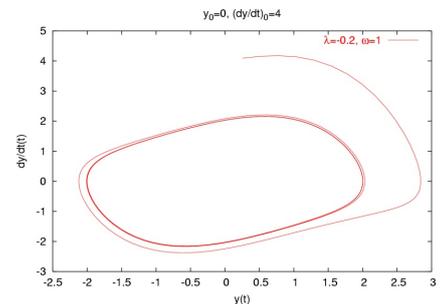
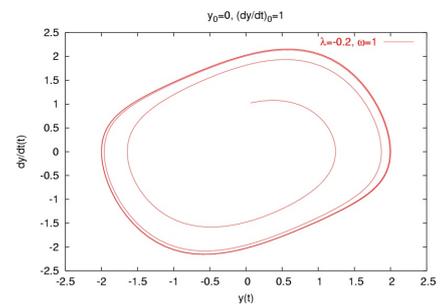
$$A_{ij} = \left(\frac{\partial F_i}{\partial z_j}\right)_{\vec{z}_0} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\omega^2 & -2\lambda_0 \end{pmatrix}_{ij}. \quad (8.26)$$

Das entspricht dem gedämpften/angetriebenen harmonischen Oszillator (siehe Gl. (8.11)). In der Nähe des Gleichgewichts verhält sich die van-der-Pol-Gleichung also wie ein gedämpfter/angetriebener harmonischer Oszillator.

- Abseits des Gleichgewichts ist die van-der-Pol-Gleichung jedoch nicht linear. Höhere Terme in der Entwicklung um die Gleichgewichtslage können nicht mehr vernachlässigt werden. Die Phasenraumdarstellung zeigt, dass die Lösungskurven für große Zeiten zum stabilen Attraktor hin laufen.



Auslenkung und Geschwindigkeit eines Oszillators, der durch die van-der-Polsche Gleichung beschrieben wird



Bewegung des van-der-Polschen Oszillators im Phasenraum aus verschiedenen Anfangszuständen hin zum Attraktor

## 8.2 Chaos in der Himmelsmechanik

### 8.2.1 Saturnmond Hyperion

- Wir betrachten die Ellipsen-Bewegung des asymmetrischen Mondes Hyperion um den Planeten Saturn. Die Asymmetrie des Mondes werde dadurch modelliert, dass er aus zwei verschiedenen langen Hanteln zusammen gesetzt gedacht wird, an deren Enden jeweils Massenpunkte mit demselben Massenanteil  $m$  sitzen. Die Längen der beiden Hanteln seien  $d$  und  $e < d$ . Die drei Achsen der Hauptträgheitsmomente sind entlang der kürzeren Hantel,

entlang der längeren Hantel und senkrecht auf beiden gerichtet. Die Hauptträgheitsmomente sind

$$\Theta_e = \frac{m}{2}e^2 < \Theta_d = \frac{m}{2}d^2 < \Theta_3 = \frac{m}{2}(d^2 + e^2). \quad (8.27)$$

Für unsere Stabilitätsbetrachtung betrachten wir die Rotation um die 3-Achse mit dem zeitabhängigen Winkel  $\phi$ . Beim asymmetrischen Kreisel war diese Rotation mit dem größten Trägheitsmoment stabil. Mit äußeren Kräften gilt

$$M = \dot{L} = \Theta_3 \dot{\omega} = \Theta_3 \ddot{\phi} \quad (8.28)$$

In dieser skalaren Form haben wir den Einheitsvektor  $\vec{e}_3$  auf beiden Seiten vernachlässigt. Zum Drehmoment durch die Anziehungskraft des Saturns das Drehmoment tragen nach (8.27) alle vier Massenpunkte auf den beiden Achsen  $d$  und  $e$  bei.

- Beginnen wir mit der längeren der beiden Achsen. Deren Drehmoment  $M_d$  kommt durch die an den beiden Massepunkten anliegende Anziehungskraft

$$\vec{F}_i = -\frac{GMm}{r_i^3} \vec{r}_i \quad \text{mit} \quad \vec{r}_{1,2} = \vec{r} \pm \frac{\vec{d}}{2}. \quad (8.29)$$

Wegen  $d \ll |\vec{r}|$  gilt

$$\begin{aligned} r_{1,2}^3 &= \left[ \left( \vec{r} \pm \frac{\vec{d}}{2} \right)^2 \right]^{3/2} = r^3 \left[ 1 \pm \frac{d}{r} \cos \alpha + \frac{d^2}{4r^2} \right]^{3/2} \\ &\approx r^3 \left[ 1 \pm \frac{3d}{2r} \cos \alpha + \mathcal{O}\left(\frac{d^2}{r^2}\right) \right] \\ \Rightarrow \vec{F}_{1,2} &\approx -\frac{GMm}{r^3} \left( 1 \mp \frac{3d}{2r} \cos \alpha \right) \left( \vec{r} \pm \frac{\vec{d}}{2} \right), \end{aligned} \quad (8.30)$$

wobei  $\alpha$  der Winkel zwischen  $\vec{r}$  und  $\vec{d}$  ist. Die Beträge der Kreuzprodukte im entsprechenden Drehmoment

$$\vec{M}_d = \frac{\vec{d}}{2} \times (\vec{F}_1 - \vec{F}_2) \quad (8.31)$$

sind damit

$$\begin{aligned} \left| \frac{\vec{d}}{2} \times \vec{F}_{1,2} \right| &\approx -\frac{GMm}{2r^3} \left( 1 \mp \frac{3d}{2r} \cos \alpha \right) \left| \vec{d} \times \left( \vec{r} \pm \frac{\vec{d}}{2} \right) \right| \\ &\approx -\frac{GMm}{2r^3} \left( 1 \mp \frac{3d}{2r} \cos \alpha \right) dr \sin \alpha \\ \Rightarrow \vec{M}_d &= -\frac{GMm}{2r^3} \left( -\frac{3d}{r} \cos \alpha \right) dr \sin \alpha \vec{e}_3 \\ &= \frac{GMm}{2r^3} 3d^2 \frac{\sin(2\alpha)}{2} \vec{e}_3 = \frac{3GM}{2r^3} \Theta_d \sin(2\alpha) \vec{e}_3. \end{aligned} \quad (8.32)$$

- Entsprechend erhält man für die darauf senkrecht stehende, zweite Hantel ebenfalls in die Richtung des größten Trägheitsmoments

$$\vec{M}_e = -\frac{3GM}{2r^3} \Theta_e \sin(2\alpha) \vec{e}_3 . \quad (8.33)$$

Sie enthält wegen  $\sin(2\alpha) = -\sin(2(\alpha + 90^\circ))$  denselben Winkel. Die Bewegungsgleichung aus (8.28) ist dann

$$\begin{aligned} M &= M_d + M_e = \frac{3GM}{2r^3} (\Theta_d - \Theta_e) \sin(2\alpha) \\ \Leftrightarrow \ddot{\phi} &= \frac{GM}{2r^3} \frac{3(\Theta_d - \Theta_e)}{\Theta_3} \sin(2\alpha) . \end{aligned} \quad (8.34)$$

Ebenso trägt zumindest eine Projektion des zeitabhängigen Winkels  $\alpha$  zu der Gesamtänderung von  $\phi$  bei. Wir schreiben ohne Herleitung dieser Relation  $\alpha = \varphi - \phi$ , definieren außerdem  $\beta^2 = 3(\Theta_d - \Theta_e)/\Theta_3$  und erhalten

$$\ddot{\phi} = \frac{GM}{r^3} \frac{\beta^2}{2} \sin[2(\varphi - \phi)] . \quad (8.35)$$

Diese Formel sieht einfach aus, aber wir müssen in Erinnerung behalten, dass bei einer Ellipsenbahn nicht nur  $\phi$  und  $\varphi$ , sondern auch  $r$  von der Zeit abhängen. Für das Verhalten der Bahnbewegung ist dies in riesiger Unterschied.

- Die Kreisbahn als Spezialfall ist ungleich einfacher. Es gilt  $r = \text{konst}$  und  $\varphi = \omega t$ . Die konstante Winkelgeschwindigkeit im Gravitationsfeld ist  $GM/r^3 = \omega^2$ , und damit

$$\begin{aligned} \ddot{\phi} &= \frac{\beta^2}{2} \omega^2 \sin [2(\omega t - \phi)] \\ \Leftrightarrow \dot{\phi}' &= -\frac{\beta^2}{2} \omega^2 \sin 2\phi' \end{aligned} \quad (8.36)$$

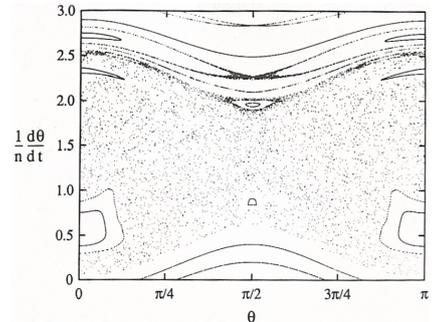
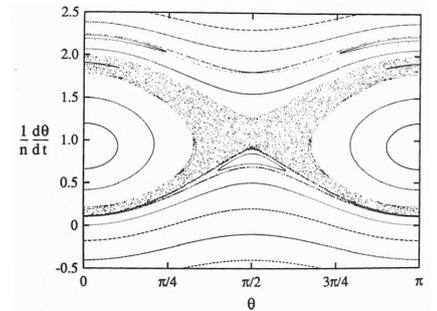
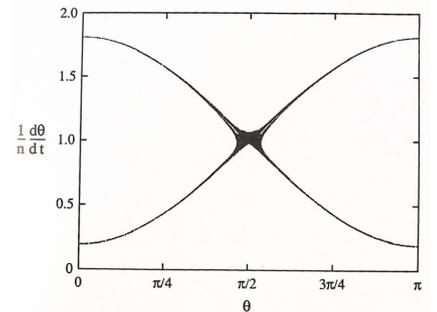
mit  $\phi' = \phi - \omega t$ . Diese Bewegungsgleichung enthält nur die Zeitabhängigkeit von  $\phi'$  und kann damit integriert werden. folgt. Nach Multiplikation mit  $\dot{\phi}'$  lässt sich (8.36) ein Mal integrieren,

$$(\dot{\phi}')^2 = \frac{\beta^2}{2} \omega^2 \cos 2\phi' + C , \quad (8.37)$$

wobei die Integrationskonstante  $C$  auftritt.

### 8.2.2 Chaotisches Tauseln auf der Ellipsenbahn

- Der asymmetrische Mond auf der elliptischen Bahn zeigt chaotisches Verhalten. Um dieses sichtbar zu machen, benutzt man die so genannte Poincaré-Abbildung: In festen Zeitabständen wird die Lage des Systems im Phasenraum dargestellt.



Poincaré-Abbildungen für die Marsmonde Deimos (oben, mit Exzentrizität  $\varepsilon = 0.0005$ ,  $\beta = 0.81$ ), Phobos (Mitte,  $\varepsilon = 0.015$ ,  $\beta = 0.83$ ) und den Saturnmond Hyperion (unten,  $\varepsilon = 0.1$ ,  $\beta = 0.89$ ). Der Winkel  $\theta$  in den Abbildungen entspricht  $\phi$  im Skript.

- Im Fall des Mondes auf seiner Umlaufbahn wählt man als festen Zeitabstand die Umlaufperiode um den Saturn und gibt etwa bei jedem Durchgang des Mondes durch sein Perisaturnion seine Orientierung  $\theta$  sowie dessen Änderung  $\dot{\theta}$  an.
- Führt man dies für einige zufällig gewählte Anfangswerte  $\theta_0$  und  $\dot{\theta}_0$  durch und betrachtet die Poincaré-Abbildung nach sehr vielen Umläufen, zeigt sich ein charakteristisches Bild: Bereichen, in denen geordnetes Verhalten auftritt, stehen Bereiche gegenüber, in denen sich die Position des Systems im Phasenraum von Umlauf zu Umlauf unkontrollierbar ändert: Der asymmetrische Mond taumelt. Die Abbildungen zeigen die Poincaré-Abbildungen für die Marsmonde Phobos und Deimos und für den Saturnmond Hyperion.

## **Teil II**

# **Statistik und Thermodynamik**

# Kapitel 9

## Statistische Physik

In den vorigen Kapiteln haben wir unsere Techniken zur Beschreibung von physikalischen Körpern immer weiter verfeinert. Im letzten Schritt haben wir den Phasenraum eingeführt und aus dem zeitlichen Verlauf von Lösungen im Phasenraum grundsätzliche Aspekte unseres Systems analysiert. Bei der Interpretation von Scharen von Trajektorien haben wir bemerkt dass uns bislang eine Beschreibung von Systemen von mehr als einem Massenpunkt im Phasenraum fehlt. Statistisch erwarten wir dass Systeme mit einer kleinen Anzahl von Massenpunkten schwer zu beschreiben sind, wir gehen also direkt zu großen Systemen über.

### 9.1 Informations-Entropie

Bevor wir komplexe Systeme statistisch durch Wahrscheinlichkeiten beschreiben, benötigen wir einen Grundbegriff der Statistik, die Informations-Entropie. Sie wurde 1948 von Claude Shannon eingeführt.

- Als Motivation betrachten wir ein System mit  $\Omega = 2^N$  möglichen und gleich wahrscheinlichen Zuständen

$$p_j = 2^{-N} \quad \text{mit} \quad \sum_j p_j = 2^N 2^{-N} = 1, \quad (9.1)$$

und fragen uns, wie wir mit 0-1-Fragen herauszubekommen in welchem Zustand sich das System befindet. Der effektivste Algorithmus ist ein Entscheidungsbaum, der Schritt für Schritt die möglichen Zustände in zwei gleich große Teile aufzuspaltet und fragt, in welchem der beiden Teile sich das System befindet. Dieser Algorithmus verhindert, dass wir uns durch eine falsch gestellte Frage auf den Holzweg begeben und garantiert das richtige

Ergebnis. Wir brauchen dann genau

$$N = -\log_2 p_j = \frac{\ln p_j}{\ln 2} \quad (9.2)$$

Antworten 0 oder 1, um unseren Zustand eindeutig zuzuordnen.

- Nehmen wir jetzt an, dass  $\Omega$  Zustände mit verschiedenen Wahrscheinlichkeiten  $p_j$  auftreten. In diesem Fall ist haben verschiedene Äste unseres Entscheidungsbaumes verschiedene Wahrscheinlichkeiten. Die Anzahl der notwendigen Fragen ist nicht mehr deterministisch, sondern nur noch als Erwartungswert bestimmt

$$\begin{aligned} \langle -\log_2 p_j \rangle &= -\frac{1}{\ln 2} \sum_{j=1}^{\Omega} p_j \ln p_j \equiv \frac{S}{\ln 2} \\ \Leftrightarrow S &= -\sum_{j=1}^{\Omega} p_j \ln p_j \quad \text{mit} \quad \sum_{j=1}^{\Omega} p_j = 1. \end{aligned} \quad (9.3)$$

Nach dieser Definition misst die Informations-Entropie die (logarithmische) Unsicherheit in Einheiten von  $\ln 2$ , sogenannten Bits. Unsicherheit ist hier die Menge an Information, die wir im Mittel benötigen, um den richtigen Zustand zu identifizieren.

- Zunächst sehen wir sofort, dass für  $p_j \in [0, 1]$  jeder Summand in (9.3) positiv ist, und damit  $S \geq 0$ . Das Minimum  $S = 0$  nimmt die Entropie genau dann an, wenn es nur einen Summanden gibt, der dann verschwindet,  $p_j = 1$ . In diesem Fall kennen wir das System ohne Unsicherheit. Die maximale Entropie können wir für zwei mögliche Ausgänge einfach bestimmen,

$$\begin{aligned} p_1 &= p & p_2 &= 1 - p \\ S &= -[p \ln p + (1 - p) \ln(1 - p)] \\ \frac{dS}{dp} &= -\left[ \ln p + \frac{p}{p} - \ln(1 - p) - \frac{1 - p}{1 - p} \right] \\ &= -\ln p + \ln(1 - p) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad p = 1 - p = \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (9.4)$$

Allgemein ist die Entropie für  $\Omega = 1/p$  gleich verteilte Zustände maximal, und ihr Wert hängt von der Anzahl der Zustände ab,

$$S \leq -\sum_{j=1}^{\Omega} p \ln p = -\frac{p}{p} \ln p = -\ln p = \ln \Omega. \quad (9.5)$$

- Im Hinblick auf Physik-Anwendungen können wir fragen, was mit der Entropie geschieht, wenn wir die möglichen Zustände eines Systems in zwei Systeme aufspalten. Wenn die beiden Systeme

me statistisch unabhängig sind, dann gilt nach den Kolmogorov-Axiomen  $p_{i,j} = p_i p_j$  und damit

$$\begin{aligned}
 S_{12} &= - \sum_{i,j} p_i p_j (\ln p_i + \ln p_j) \\
 &= - \sum_{i=1}^{\Omega_1} \left( \sum_{j=1}^{\Omega_2} p_j \right) p_i \ln p_i - \sum_{j=1}^{\Omega_2} \left( \sum_{i=1}^{\Omega_1} p_i \right) p_j \ln p_j \\
 &= - \sum_{i=1}^{\Omega_1} p_i \ln p_i - \sum_{j=1}^{\Omega_2} p_j \ln p_j = S_1 + S_2 . \quad (9.6)
 \end{aligned}$$

- Wenn die Wahrscheinlichkeiten in den beiden Systemen  $\Omega_1$  und  $\Omega_2$  nicht unabhängig sind, dann ist die Entropie nicht additiv. Wir können aber bedingte Wahrscheinlichkeiten nutzen und eine entsprechenden bedingte Entropie definieren,

$$\begin{aligned}
 S_{12} &= - \sum_{i,j} p_{i,j} \ln p_{i,j} \\
 &= - \sum_{i,j} p_{i,j} \ln(p_{i|j} p_j) \\
 &= - \sum_{i,j} p_{i,j} \ln p_{i|j} - \sum_{i,j} p_{i,j} \ln p_j \\
 &\equiv S_{1|2} - \sum_{i,j} p_{i|j} p_j \ln p_j \\
 &= S_{1|2} - \sum_{j=1}^{\Omega_2} \left( \sum_{i=1}^{\Omega_1} p_{i|j} \right) p_j \ln p_j \\
 &= S_{1|2} - \sum_{j=1}^{\Omega_2} p_j \ln p_j = S_{1|2} + S_2 . \quad (9.7)
 \end{aligned}$$

- Da gleichverteilte Systeme die Entropie maximieren, sollte intuitiv die Gesamt-Entropie nicht unabhängiger Systeme kleiner sein als die Summe in (9.6),

$$S_{12} = S_1 + S_2 - I_{12} . \quad (9.8)$$

Wir nennen  $I_{12}$  die mutual information und können sie mit Hilfe der bedingten Wahrscheinlichkeiten berechnen,

$$\begin{aligned}
 I_{12} &= S_1 + S_2 - S_{12} \\
 &= - \sum_{i=1}^{\Omega_1} \left( \sum_{j=1}^{\Omega_2} p_{j|i} \right) p_i \ln p_i - \sum_{j=1}^{\Omega_2} \left( \sum_{i=1}^{\Omega_1} p_{i|j} \right) p_j \ln p_j + \sum_{i,j} p_{i,j} \ln p_{i,j} \\
 &= - \sum_{i,j} \left[ p_i p_{j|i} \ln p_i + p_j p_{i|j} \ln p_j - p_{i,j} \ln p_{i,j} \right] \\
 &= - \sum_{i,j} p_{i,j} \ln \frac{p_i p_j}{p_{i,j}} \equiv D_{\text{KL}}[p_{i,j}, p_i p_j] > 0 . \quad (9.9)
 \end{aligned}$$

Dieses Funktional heisst Kullback–Leibler-Divergenz und vergleicht zwei Wahrscheinlichkeitsverteilungen, ausgewertet auf einem Datensatz, der der ersten Wahrscheinlichkeitsverteilung entspricht

$$D_{\text{KL}}[p_a, p_b] = \sum p_a \ln \frac{p_a}{p_b} \neq D_{\text{KL}}[p_b, p_a] . \quad (9.10)$$

Sie wird uns in der Statistischen Physik und im maschinellen Lernen wieder begegnen.

Wir können nach dieser Herleitung also die gemeinsame (joint) Entropie eines Systems mit zwei Untersystemen auf eine Reihe von Arten schreiben,

$$\begin{aligned} S_{12} &= S_{1|2} S_2 \\ &= S_1 S_{2|1} \\ &= S_1 + S_2 - I_{12} \\ &= S_{1|2} + S_{2|1} + I_{12} . \end{aligned} \quad (9.11)$$

- In der Statistik wie auch in der Physik interessiert uns die Verteilung von Zuständen mit maximaler Entropie, nach Variationsrechnung

$$\begin{aligned} \delta S &= - \sum_{j=1}^{\Omega} \left( \delta p_j \ln p_j + p_j \frac{\delta p_j}{p_j} \right) \\ &= - \sum_{j=1}^{\Omega} (\ln p_j + 1) \delta p_j = 0 . \end{aligned} \quad (9.12)$$

Wir wissen außerdem, dass es Erhaltungsgrößen wie zum Beispiel die Gesamtenergie gibt. Für unser System mit  $\Omega$  Zuständen kann man eine solche Erhaltungsgröße berücksichtigen als

$$\sum_{j=1}^{\Omega} E_j p_j = \text{konst.} \quad \text{und} \quad \sum_{j=1}^{\Omega} p_j = 1 . \quad (9.13)$$

Um unter diesen beiden Bedingungen die Entropie zu maximieren nutzen wir Lagrange-Multiplikatoren in (9.12)

$$\begin{aligned} \delta S &= - \sum_{j=1}^{\Omega} [\ln p_j + 1 + \alpha + \beta E_j] \delta p_j = 0 \\ \Leftrightarrow \quad p_j &= e^{-(1+\alpha)} e^{-\beta E_j} \equiv \frac{1}{Z} e^{-\beta E_j} . \end{aligned} \quad (9.14)$$

Wir werden sehen, wie man die Lagrange-Parameter  $\alpha$  oder  $Z$  und  $\beta$  aus (9.13) bestimmen kann.

## 9.2 Grundpostulat

### 9.2.1 Makrozustände

- Nehmen wir an, wir hätten die Bewegungsgleichungen für ein beliebig komplexes nicht-chaotisches System gelöst. Dann wären die verallgemeinerten Koordinaten  $q_i$  und die dazu kanonisch konjugierten Impulse  $p_i$  zu jedem Zeitpunkt bekannt, wenn sie zu einem Zeitpunkt bekannt waren. Für ein System mit  $f$  Freiheitsgraden spannen sie den  $2f$ -dimensionalen Phasenraum auf.
- Je größer die Anzahl  $f$  der Freiheitsgrade, desto eher können wir unser System statistisch beschreiben. Betrachten wir zum Beispiel einen Liter eines Gases mit der Teilchenzahl

$$N = \frac{6.022 \times 10^{23}}{22.4} = 2.69 \times 10^{22}$$

$$f = 3N = 8.07 \times 10^{22} \quad (9.15)$$

Offensichtlich sind hier der Ort und der Impuls jedes einzelnen Teilchens nicht relevant, und wir können zum Beispiel die Phasenraumkoordinaten identischer Teilchen einfach vertauschen.

- Der genaue mechanische Zustand des Systems, die Phasenraumkoordinaten, sind für unser physikalisches Verständnis unwichtig. Stattdessen sind wir typischerweise am *Makrozustand* des Systems interessiert, also an den physikalischen Eigenschaften des Gesamtsystems, die durch wenige, makroskopisch Messgrößen  $x$  ausgedrückt werden. Solche makroskopischen Parameter können zum Beispiel die Gesamtenergie, das Volumen, der Druck oder die Temperatur eines Gases sein.

### 9.2.2 Mikrozustände

- Um einen Makrozustand physikalisch zu beschreiben gliedern wir den  $2f$ -dimensionalen Phasenraum in  $n$  Zellen der Größe,

$$\delta q \delta p = h, \quad (9.16)$$

wobei  $h$  in der klassischen Mechanik beliebig klein gewählt werden kann. Das System kann nun durch die Angabe der Zelle gekennzeichnet werden, in der es sich gerade befindet. Jede Phasenraumzelle kennzeichnet einen *Mikrozustand* des Systems. Über die Größe  $h$  stellen wir ein, wie präzise wir das System verstehen wollen.

- Wir erwarten dass sich unser System aus dem Makrozustand  $x$  in verschiedenen zugänglichen Mikrozuständen aufhalten kann.

Sie beschreiben also ein Ensemble physikalischer Systeme, die makroskopisch identisch sind. Uns interessiert dann die *Wahrscheinlichkeit*  $p_j$ , dass sich unser System mit makroskopischen Zustandsparametern  $x$  in einem Mikrozustand  $j$  befindet.

Wir beschränken uns zuerst auf Systeme, für die sich die  $p_j$  zeitlich nicht ändern. Solche Systeme sind makroskopisch unverändert und mikroskopisch im Gleichgewicht. Für isolierte Systeme im Gleichgewicht mit konstanter Gesamtenergie  $E$  postulieren wir:

*Isolierte Systeme im Gleichgewicht halten sich mit gleicher Wahrscheinlichkeit in jedem ihnen zugänglichen Mikrozustand auf.*

- Wir betrachten makroskopisch einen schmalen Energiebereich  $E + \delta E$  mit  $\delta E \ll E$ , und wir bezeichnen die Anzahl der von hier zugänglichen Mikrozustände als *mikrokanonische Zustands-summe*

$$\Omega(E) \times \delta E = \sum_{E_j \in [E, E + \delta E]} 1. \quad (9.17)$$

Falls es einfacher ist, die Zustände mit Energien kleiner als  $E$  zu zählen, dann können wir stattdessen diese Anzahl  $\Phi(E)$  nutzen und für den Energiebereich taylorln,

$$\Omega(E) \times \delta E = \Phi(E + \delta E) - \Phi(E) \approx \frac{\partial \Phi(E)}{\partial E} \delta E. \quad (9.18)$$

Diese Form motiviert die Separation von  $\delta E$  in (9.17). Unser Grundpostulat bedeutet für die mikrokanonischen Wahrscheinlichkeiten

$$p_j(E) \equiv p(E_j) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega(E)} & E_j \in [E, E + \delta E] \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Nach (9.5) wissen wir, dass für gleiche Wahrscheinlichkeiten die Informationsentropie maximal wird,

$$S(E) = - \sum_{j=1}^{\Omega(E)} p_j \ln p_j = \ln \Omega(E). \quad (9.19)$$

Unser Grundpostulat heisst also nichts anderes, als dass sich isolierte Systeme im Gleichgewicht im Zustand maximaler Entropie befinden.

- Mit Hilfe der Statistik beschreiben wir, welchen mittleren Wert ein Parameter  $x$  des Systems haben wird. Die Anzahl der Zustände in dem zugehörigen Bereich sei  $\Omega(E; x)$ , dann ist

$$p(x_j) = \frac{\Omega(E; x_j)}{\Omega(E)}$$

$$\langle x \rangle = \sum_j x_j p(x_j) = \frac{1}{\Omega(E)} \sum_j x_j \Omega(E; x_j). \quad (9.20)$$

### 9.2.3 Anzahl zugänglicher Zustände

- Wir berechnen nun die Anzahl der zugänglichen Zustände eines idealen Gases mit  $N$  Teilchen oder  $f = 3N$  Freiheitsgraden. Für sehr grosse  $N$  ist es sinnvoll, das Phasenraum-Volumen kontinuierlich zu betrachten, wir erhalten dann für die Zustandssumme

$$\Omega(E) \times \delta E = \int_E^{E+\delta E} d\vec{q} d\vec{p} \, 1, \quad (9.21)$$

und für den Erwartungswert einer Größe  $x$

$$\langle x \rangle = \frac{\int_E^{E+\delta E} d\vec{q} d\vec{p} \, x(E)}{\int_E^{E+\delta E} d\vec{q} d\vec{p}}. \quad (9.22)$$

- Ideal heißt ein Gas, dessen Teilchen nur durch direkte Stöße miteinander wechselwirken und keine innere Struktur haben. Teilchen ohne Struktur können nicht rotieren, und die potentielle Energie verschwindet, wenn der Stoss mit einem kurzreichweitigen Potential verknüpfen. Die gesamte Energie ist also

$$E = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m}. \quad (9.23)$$

- Für das Integral über die verallgemeinerten Koordinaten betrachten wir zuerst den Ortsraum für jedes Gasteilchen, weil die kinetische Energie nicht vom Ort abhängt,

$$\int dq_1 dq_2 dq_3 = V \quad \Rightarrow \quad \int d\vec{q} = V^{f/3}. \quad (9.24)$$

Das Integral über die Impulse ist mit der Energie verbunden. Wegen (9.23) ist die Fläche konstanter Energie im  $f$ -dimensionalen Impulsraum eine Kugelschale mit Radius

$$R = \sqrt{\sum_{i=1}^N \vec{p}_i^2} = \sqrt{2mE}. \quad (9.25)$$

Das Volumen dieser Kugel ist analog zum 3-dimensionalen Raum proportional zu  $R^f$ , die Proportionalitätskonstante ist für diese Betrachtung uninteressant,

$$\begin{aligned} \Phi(E) &\propto (2mE)^{f/2} \\ \Rightarrow \frac{\partial \Phi(E)}{\partial E} &\propto \frac{f}{2} 2m (2mE)^{f/2-1} \approx mf (2mE)^{f/2} \\ \Rightarrow \Omega(E) &\propto V^{f/3} mf (2mE)^{f/2} \\ \Rightarrow S(E) = \ln \Omega(E) &= \ln [fE^{f/2}] + \dots \end{aligned} \quad (9.26)$$

Die Proportionalität zu  $\delta E$  haben wir separiert, aber wir sehen dass  $S(E)$  proportional zur Anzahl der Freiheitsgrade  $f$  ist.

## 9.3 Wechselwirkungen zwischen Systemen

Bei der Beschreibung von Systemem mit vielen elementaren Freiheitsgraden ist der Schlüssel zur mikroskopischen Physik die Wechselwirkung zwischen den Teilchen.

### 9.3.1 Gleichgewicht und Liouvillescher Satz

- Wir haben noch nicht gezeigt, dass unser Grundpostulat mit der klassischen Mechanik verträglich ist. Dazu nutzen wir den Liouvillesche Satz aus 7.3. Betrachten wir ein Ensemble aus einer großen Zahl gleichartiger Objekte, deren Mikrozustand durch die  $2f$  Phasenraumkoordinaten  $(\vec{q}, \vec{p})$  gekennzeichnet ist. Einige der Objekte werden sich zur Zeit  $t$  im Volumen zwischen  $q$  und  $q + dq$  und zwischen  $p$  und  $p + dp$  befinden. Diese Anzahl bezeichnen wir mit

$$\rho(\vec{q}, \vec{p}, t) d\vec{q} d\vec{p} . \quad (9.27)$$

Das vom System eingenommene Phasenraum-Volumen kann sich verschieben und deformieren, aber der Liouvillesche Satz besagt, dass es zeitlich konstant ist, also

$$0 = \frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial p_j} \dot{p}_j . \quad (9.28)$$

- Wenn jeder zugängliche Zustand mit gleicher Wahrscheinlichkeit auftritt, dann ist die Verteilung der Objekte im entsprechenden Phasenraum konstant oder null, also

$$\frac{\partial \rho}{\partial q_i} = 0 = \frac{\partial \rho}{\partial p_j} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 . \quad (9.29)$$

Wenn also einmal alle Zustände gleich wahrscheinlich sind, dann ändert sie sich in der klassischen Mechanik nicht mehr. Das entspricht unserer Definition des Gleichgewichts.

- Betrachten wir ein isoliertes System im Gleichgewicht. Es hält sich mit gleicher Wahrscheinlichkeit  $p_j$  in jedem ihm zugänglichen Zustand auf. In einem Ensemble aus einer großen Zahl  $N$  gleichartiger Objekte sollten  $p_j \times N$  von ihnen in jedem dieser Zustände zu finden sein.

Da das System isoliert ist, ist seine Energie  $E$  konstant. Ändern wir aber einen anderen makroskopischen Parameter so, dass sich der zugängliche Phasenraum ändert, dann wird das System aus dem Gleichgewicht gebracht.

- Wenn sich der zugängliche Bereich im Phasenraum vergrößert, dann werden bislang unbesetzte Zustände zugänglich. Um wieder ins Gleichgewicht zu kommen, müssen Wechselwirkungen zwischen den Objekten dafür sorgen, dass auch bislang unbesetzte Zustände erreicht werden. Wie lange dieser Vorgang dauert, hängt von der Stärke der Wechselwirkung ab.

Wenn sich der zugängliche Bereich verkleinert, muss für jetzt ausgeschlossenen Zustände die Wahrscheinlichkeit auf Null sinken. Dementsprechend größer muss die Wahrscheinlichkeit an den weiterhin zugänglichen Stellen des Phasenraums werden. Wiederum müssen die Wechselwirkungen zwischen den Komponenten des Systems für diese Entwicklung sorgen.

- Ein Beispiel für solche Vorgänge ist ein isoliertes Volumen, das zunächst durch eine undurchlässige Wand in zwei Hälften geteilt wird. Nur eine Hälfte sei anfänglich mit Gas gefüllt. Wenn jetzt die Wand entfernt wird, verdoppelt sich bei gleich bleibender Gesamtenergie der Gasteilchen das zugängliche Volumen. Umgekehrt kann das einem Gas zugängliche Volumen in einem Zylinder dadurch verringert werden, dass ein Kolben in den Zylinder geschoben wird.

### 9.3.2 Mechanische Arbeit und Wärme

- Nach der Definition der Hamiltonfunktion wird die Energie eines Systems im Zustand  $n$  durch alle Parameter  $x_j$  beeinflusst, die in seiner Hamiltonfunktion  $E_n(x)$  auftauchen. Das gilt auch wenn die Parameter  $x_j$  den Makrozustand beschreiben, sie heißen dann äußere Parameter oder *Zustandsparameter*. Beispiele dafür sind das Volumen oder der Druck eines Gases, ein äusseres elektrisches oder magnetisches Feld, usw.
- Wir sollten offensichtlich Wechselwirkungen, durch die sich die Zustandsparameter  $x_j$  nicht verändern, von solchen unterscheiden sollten, in denen sie sich ändern. Wir stellen uns zwei Systeme  $A$  und  $B$  vor, die *gemeinsam* gegenüber ihrer Umwelt isoliert sind, *zwischen* denen aber Energie ausgetauscht werden kann. Wenn die Zustandsparameter unverändert bleiben, dann muss die Gesamtenergie erhalten bleiben,

$$\Delta E_A + \Delta E_B = 0 \quad \text{oder} \quad \Delta E_{A,B} = \pm Q . \quad (9.30)$$

Dabei bezeichnen wir mit  $Q$  die Energie oder *Wärmemenge*, die ohne Veränderung der Zustandsparameter von einem an das andere System abgegeben wird.

- Alternativ können wir den direkten Energieaustausch zwischen den beiden Systemen unterbinden, aber eine mechanische Wechselwirkung zulassen. Das klassische Beispiel ist ein Gasvolumen, das durch eine bewegliche Wand in zwei Hälften  $A$  und  $B$  unterteilt wird. Indem das Gas in einem Teilvolumen die Wand zum anderen hin verschiebt, verrichtet es mechanische Arbeit am anderen System. Damit ändern sich für beide Teilsysteme zumindest einige Zustandsparameter, und daher auch deren Energie um  $\Delta E_{A,B}$ . Die entsprechende mechanische Energieänderung heisst  $W$ ,

$$\Delta E_{A,B} + W_{A,B} = 0 \quad \text{oder} \quad \Delta E_{A,B} = -W_{A,B} . \quad (9.31)$$

- Im Allgemeinen wird die Energie jedes der beiden Systeme sich sowohl durch Energieaustausch als auch durch mechanische Arbeit verändern. Mit (9.30) und (9.31) gilt also

$$\Delta E_{A,B} = -W_{A,B} + Q_{A,B} . \quad (9.32)$$

Diese Gleichung verknüpft die *Wärmemenge*  $Q$ , die ohne Veränderung der Zustandsparameter aufgenommen oder abgegeben wird mit der *vom System verrichtete mechanische Arbeit*  $W$ .

Für eine kontinuierlichen Energie des Systems definieren wir infinitesimale Änderungen  $dE$  und unterdrücken den Index Wir schreiben allerdings der Sicherheit halber die infinitesimale Version von (9.32) als

$$dE = -\bar{d}W + \bar{d}Q \quad (9.33)$$

mit quergestrichenem  $\bar{d}$ , weil nicht klar ist, ob wir diese Gleichung aufintegrieren können.

### 9.3.3 Unvollständige Differentiale

- Wir erinnern uns zunächst an das vollständige Differential einer Funktion  $F(x, y)$ ,

$$\begin{aligned} dF &= \frac{\partial F(x, y)}{\partial x} dx + \frac{\partial F(x, y)}{\partial y} dy \\ &=: A(x, y)dx + B(x, y)dy . \end{aligned} \quad (9.34)$$

Ein vollständiges Differential hängt nicht vom Weg ab, analog zur Definition konservativer Kräfte im vorigen Semester. Wir können es also entlang eines Pfades in  $x$  und  $y$  integrieren,

$$\begin{aligned} \int_1^2 dF &= \int_1^2 [A(x, y)dx + B(x, y)dy] \\ &= \int_{(x_1, y_1)}^{(x_2, y_1)} A(x, y)dx + \int_{(x_1, y_1)}^{(x_2, y_2)} B(x, y)dy \\ &= F(x_2, y_2) - F(x_1, y_1) , \end{aligned} \quad (9.35)$$

und erhalten ein eindeutiges Ergebnis. Wir kennen diesen Zusammenhang zwischen vollständigen Differentialen und Funktionen von konservativen Kraftfeldern, die eindeutig als Gradient eines Potentials dargestellt werden können.

- Um  $\delta Q$  oder  $\delta W$  zu verstehen, beginnen wir umgekehrt mit zwei Funktionen  $C(x, y)$  und  $D(x, y)$  und definieren umgekehrt

$$\delta G(x, y) := C(x, y)dx + D(x, y)dy . \quad (9.36)$$

Dies ist ein vollständiges Differential, wenn es eine Funktion  $G(x, y)$  gibt, für die

$$C(x, y) = \frac{\partial G(x, y)}{\partial x} \quad \text{und} \quad D(x, y) = \frac{\partial G(x, y)}{\partial y} \quad (9.37)$$

gilt. Die beiden Funktionen  $C$  und  $D$  können aber eventuell nicht als partielle Ableitungen *einer* Funktion nach  $x$  und nach  $y$  dargestellt werden. Das Integral

$$\int_1^2 \delta G \quad (9.38)$$

von  $(x_1, y_1)$  zu  $(x_2, y_2)$  kann natürlich berechnet werden, wird aber vom Integrationsweg abhängen.

- Als Beispiel betrachten wir

$$C(x, y) = C_0 \quad \Rightarrow \quad G(x, y) = C_0 x + g(y) \quad (9.39)$$

und

$$D(x, y) = \frac{x}{y} \quad \Rightarrow \quad G(x, y) = x \ln y + h(x) . \quad (9.40)$$

Um beide Definitionen von  $G(x, y)$  zu kombinieren setzen wir  $h(x) = C_0 x$ , aber  $x \ln y$  kann nicht in  $g(y)$  absorbiert werden. Hier kann also das infinitesimal kleine  $\delta G$  nicht als Differenz zwischen infinitesimal benachbarten Werten einer Funktion  $G$  aufgefasst werden. Es heißt *unvollständiges Differential*.

- In diesem Sinn sind  $\delta Q$  und  $\delta W$  zunächst unvollständige Differentiale: Sie sind infinitesimal klein, aber allgemein nicht als Ableitungen zweier Funktionen  $Q$  und  $W$  darstellbar. Die ausgetauschte Wärme  $\delta Q$  oder die von einem System verrichtete Arbeit  $\delta W$  sind während des jeweiligen Vorgangs definiert, aber nicht als Unterschied zwischen Wärmemengen  $Q_{1,2}$  oder zwei Arbeitsmengen  $W_{1,2}$ .

Die während eines Prozesses ausgetauschte Wärmemenge oder die dabei verrichtete Arbeit

$$Q_{12} = \int_1^2 \delta Q \quad \text{und} \quad W_{12} = \int_1^2 \delta W \quad (9.41)$$

werden vom Weg des Prozesses vom Zustand 1 zum Zustand 2 abhängen. Wenn allerdings während des Prozesses die äußeren Zustandsparameter konstant gehalten werden, wir also wissen dass keine Wärme ausgetauscht wird,  $\delta Q = 0$ , dann gilt  $\delta W = -dE$ , und die Arbeit ist unabhängig von der Prozessführung. Gleiches gilt für den Fall  $\delta Q = dE$ . Dieses Argument ist die Basis für verschiedene Kreisprozesse und den Wirkungsgrad.

### 9.3.4 Quasistatische Zustandsänderungen

- Wir können einen Prozess der Art (9.33) vereinfachen, wenn wir annehmen, dass er so langsam abläuft, dass das System nach jedem infinitesimal kleinen Schritt sein Gleichgewicht wiederfindet. Wir ändern dazu die äußeren Parameter  $x_j$  und damit auch die Energien  $E_n$  aller Zustände  $n$  infinitesimal,

$$dE_n = \frac{\partial E_n}{\partial x_j} dx_j . \quad (9.42)$$

Wenn das System im Zustand  $n$  bleibt, kompensiert es diese Energieänderung zum Beispiel, indem es Arbeit verrichtet,

$$\delta W_n = -dE_n = -\frac{\partial E_n}{\partial x_j} dx_j =: X_{n,j} dx_j . \quad (9.43)$$

Hier haben wir *verallgemeinerte Kräfte*

$$X_{n,j} := -\frac{\partial E_n}{\partial x_j} \quad (9.44)$$

eingeführt. Für ein Ensemble von Systemen, die nach unserem Postulat jeden Zustand  $n$  mit gleicher Wahrscheinlichkeit füllen, erhalten wir den Erwartungswert der vom System verrichtete Arbeit

$$\langle \delta \bar{W} \rangle = -\left\langle \frac{\partial E_n}{\partial x_j} \right\rangle dx_j = -\sum_n p_n \frac{\partial E_n}{\partial x_j} dx_j \equiv \langle X_j \rangle dx_j . \quad (9.45)$$

- Als Beispiel betrachten wir die mechanische Arbeit, die durch einen konstanten Druck verrichtet wird. Ein isolierter ( $\delta Q = 0$ ), gasgefüllter Zylinder der Querschnittsfläche  $A$  werde durch einen reibungsfrei beweglichen Kolben verschlossen,

$$dE = -\delta W . \quad (9.46)$$

Verschiebt das Gas den Kolben um  $ds$ , dann verrichtet es die Arbeit,  $\delta W = \text{Kraft} \cdot \text{Weg}$ . Die Kraft ist das Produkt aus Druck  $P$  und Fläche  $A$ , also gilt

$$\begin{aligned} \delta W &= (PA) ds = P (Ads) = P dV = -dE \\ \Leftrightarrow P &= -\frac{\partial E}{\partial V} . \end{aligned} \quad (9.47)$$

Der veränderliche äußere Parameter ist also das Volumen, und der Druck die zum Volumen gehörige verallgemeinerte Kraft,

# Kapitel 10

## Entropie

Aus dem letzten Kapitel wissen wir, dass Systeme sich aus mikroskopischer Sicht im Gleichgewicht befinden wenn jeder erlaubte Zustand besetzt ist. Für makroskopisch betrachtete Systeme ist das Grundpostulat der statistischen Physik, dass jeder zugängliche Zustand mit gleicher Wahrscheinlichkeit angenommen wird. Wir haben die Idee des Gleichgewichts formal eingeführt und an Beispielen illustriert, uns fehlt aber noch eine Verbindung dieser beiden Argumente. Dieser Teil der Vorlesung folgt Argumenten aus der Statistik-Vorlesung von Ulrich Schwarz.

### 10.1 Thermisches Gleichgewicht

#### 10.1.1 Reversible Zustandsänderungen

- Betrachten wir wieder unser isoliertes Volumen, das in zwei Volumina  $x_j = v_j$  unterteilt ist, von denen eines mit Gas gefüllt ist. Es befinde sich zunächst im Gleichgewicht. Unmittelbar nach der Entfernung der Wand kann es nicht mehr im Gleichgewicht sein, weil sich der ihm zugängliche Phasenraum vergrößert hat. Nach einiger Zeit wird es durch Wechselwirkungen wieder einen Gleichgewichtszustand mit einer größeren Anzahl

$$\Omega_f \geq \Omega_i . \quad (10.1)$$

von Zuständen erreichen. Im ersten Fall wird das System nicht in seinen Ausgangszustand zurückkehren können, im zweiten Fall hängt der Zustand des Gesamtsystems nicht von der Lage der Wand ab. Mit (10.1) definieren wir dass eine Zustandsänderung eines isolierten Systems *reversibel* ist, wenn sich die Anzahl der zugänglichen Zustände nicht verändert, und *irreversibel*, wenn sie zunimmt.

- Beim Übergang ins neue Gleichgewicht erlauben wir dass sich der Parameter  $x_k$  ändert. Die Wahrscheinlichkeit, für  $x_k$  einen Wert  $v_k$  zu messen, ist

$$p(x_k = v_k) = \frac{\Omega(x_k = v_k)}{\sum_j \Omega(x_k = v_j)}. \quad (10.2)$$

In einem Ensemble wird mit größter Wahrscheinlichkeit der Wert  $x_k$  gemessen, zu dem die größte Zahl zugänglicher Zustände gehört. Die äußeren Parameter eines isolierten Systems werden sich also dahin entwickeln, dass die Anzahl der dadurch ermöglichten, zugänglichen Zustände maximal wird. Aus dem statistischen Grundpostulat folgt also ein Extremalprinzip.

### 10.1.2 Energie, Volumen, Teilchenzahl

- In (9.26) haben wir die Zustandssumme für ein ideales Gas mit  $N \gg 1$  Teilchen und  $f = 3N$  Freiheitsgraden berechnet. Wir schauen uns die Zustandssumme noch einmal im Detail an und berücksichtigen auch die Vorfaktoren für das Volumen der Kugel im  $f$ -dimensionalen Impulsraum

$$\begin{aligned} \Omega(E) &= \frac{1}{\delta E} \int d\vec{q} \int_E^{E+\delta E} d\vec{p} \\ &\approx V^{f/3} \frac{\pi^{f/2}}{(f/2)!} m f (2mE)^{f/2}. \end{aligned} \quad (10.3)$$

- Einen Aspekt haben wir bislang nicht berücksichtigt, nämlich dass wir unsere Teilchen beliebig vertauschen können, ohne dass sich die Energie oder sonst eine Zustandsgröße verändert. Die Summe der verschiedenen Zustände bekommt also einen Permutationsfaktor,

$$\begin{aligned} \ln \Omega(E) &= \ln \left[ \frac{1}{N!} \times V^N \frac{\pi^{3N/2}}{(3N/2)!} 3mN (2mE)^{3N/2} \right] \\ &\approx N \ln V + \frac{3N}{2} \ln(2\pi mE) - \ln N! - \ln \left( \frac{3N}{2} \right)!. \end{aligned} \quad (10.4)$$

Die beiden letzten Terme können wir in demselben Limes mit Hilfe der Stirling-Formel vereinfachen

$$\begin{aligned} N! &\approx \sqrt{2\pi N} \left( \frac{N}{e} \right)^N \\ \Rightarrow \ln N! &\approx \ln \left[ \sqrt{2\pi N} \left( \frac{N}{e} \right)^N \right] = \frac{1}{2} \ln(2\pi N) + N \ln N - N \ln e \\ &\approx N \ln N - N \\ \ln \left( \frac{3N}{2} \right)! &\approx \frac{3N}{2} \ln \frac{3N}{2} - \frac{3N}{2} \end{aligned} \quad (10.5)$$

Die Zustandssumme wird

$$\begin{aligned}\ln \Omega(E) &\approx N \ln V + \frac{3N}{2} \ln(2\pi m E) - N \ln N - \frac{3N}{2} \ln \frac{3N}{2} + \frac{5N}{2} \\ &= N \left[ \ln \frac{V}{N} + \frac{3}{2} \ln \frac{4\pi m E}{3N} + \frac{5}{2} \right].\end{aligned}\quad (10.6)$$

- Wir wissen schon, dass dieser Logarithmus die Definition der Informations-Entropie ist. Die *physikalische Entropie* ist identisch, enthält aber einen noch zu bestimmenden Vorfaktor. Wir definieren sie also wie schon in (9.26) angedeutet als

$$\begin{aligned}S(E, V, N) &= k_B \ln \Omega(E, V, N) \\ &\approx k_B N \left[ \ln \frac{V}{N} + \frac{3}{2} \ln \frac{4\pi m E}{3N} + \frac{5}{2} \right].\end{aligned}\quad (10.7)$$

Diese sogenannte *mikrokanonische Zustandssumme* hängt ausser von der Energie vom Volumen  $V$  und der Teilchenzahl  $N$  ab. Tatsächlich hängt  $S/N$  nur von den Verhältnissen  $E/N$  und  $V/N$  ab, wir nennen sie daher spezifische Größen. Dieser Ausdruck für die Zustandssumme ist in der Thermodynamik bekannt, wir haben ihn aber statistisch aus der Definition der Entropie berechnet.

### 10.1.3 Temperatur

- In der Formel für die Entropie eines idealen Gases müssen wir noch die Rolle des Boltzmann-Vorfaktors  $k_B$  verstehen. Dazu schauen wir uns eine Kombination von zwei voneinander und nach aussen isolierten Systemen mit freiem Gas an. Wir wissen von der Informations-Entropie dass

$$S = S_1 + S_2 = k_B \ln \Omega_1 + k_B \ln \Omega_2. \quad (10.8)$$

Wir nennen die Entropie daher extensiv, und stellen fest dass unsere drei Zustandsparameter ebenfalls extensiv sind

$$E = E_1 + E_2 \quad V = V_1 + V_2 \quad N = N_1 + N_2. \quad (10.9)$$

- Wir bringen jetzt die beiden Systeme so in Kontakt, dass sie Energie austauschen können, aber kein Volumen und keine Teilchen. Im neuen Gleichgewichtszustand gilt also

$$E = E_1 + E_2 = E'_1 + E'_2, \quad (10.10)$$

oder infinitesimal

$$dE_1 = -dE_2, \quad (10.11)$$

Nach unserem Grundpostulat der statistischen Physik muss die gemeinsame Entropie wieder maximal werden,

$$\begin{aligned} 0 = dS &= \frac{\partial S}{\partial E_1} dE_1 + \frac{\partial S}{\partial E_2} dE_2 \\ &= \frac{\partial S_1}{\partial E_1} dE_1 - \frac{\partial S_2}{\partial E_2} dE_1 \\ \Leftrightarrow \quad \frac{\partial S_1}{\partial E_1} &= \frac{\partial S_2}{\partial E_2} . \end{aligned} \quad (10.12)$$

Offenbar ist diese Ableitung eine Eigenschaft, die beide Teile unseres Systems gemeinsam haben. Für das freie Gas ist sie

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial E} &= k_B \frac{\partial \ln \Omega}{\partial E} \\ &\approx k_B \frac{3N}{2} \frac{\partial}{\partial E} \ln \frac{4\pi m E}{3N} = k_B \frac{3N}{2E} \equiv k_B \frac{f}{2E} . \end{aligned} \quad (10.13)$$

Diese Eigenschaft wird also, bis auf einen Faktor, durch die inverse Energie pro Freiheitsgrad oder pro Teilchen beschrieben.

- Empirisch wissen wir, dass eine gleiche Temperatur  $T$  ein thermisches Gleichgewicht zwischen zwei Systemen auszeichnet. Daher sollte die Kombination  $k_B f / (2E)$  eine Funktion der Temperatur sein. Wenn die Temperatur mit zunehmender Energie zunehmen soll, dann ist die einfachste Wahl

$$\frac{1}{T} := \frac{\partial S}{\partial E} = k_B \frac{f}{2E} \quad \Leftrightarrow \quad k_B T = \frac{2E}{f} = \frac{2E}{3N} , \quad (10.14)$$

Die Gleichgewichtsbedingung (10.12) wird dann

$$T_1 = T_2 . \quad (10.15)$$

Wenn  $S$  oder  $\Omega$  mit  $E$  zunimmt, dann ist  $T \geq 0$ . Negative Temperaturen treten nur auf, wenn aufgrund spezieller äußerer Umstände die Anzahl zugänglicher Zustände mit der Energie abnimmt. Solche Situationen sind möglich aber ungewöhnlich.

Die Energie *pro Freiheitsgrad* im Gleichgewicht ist von der Ordnung  $k_B T$ . Die Boltzmann-Konstante  $k_B$  wählen wir als

$$k_B = 1.38 \times 10^{-16} \frac{\text{erg}}{\text{K}} . \quad (10.16)$$

Da im Prinzip die Anzahl der Zustände in einem isolierten System bei vorgegebener Energie abzählbar ist, kann  $\Omega(E)$  bestimmt werden. Es definiert eine absolute Temperaturskala in Kelvin.

- Wir können uns auch die Temperatur beim Übergang ins Gleichgewicht nach (10.12) ansehen,

$$dS = \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) dE_1 > 0 \quad (10.17)$$

Die Entropie wächst zu ihrem Maximum. Wenn wir annehmen dass Teilsystem 1 wärmer ist als Teilsystem 2, dann ist

$$T_1 > T_2 \quad \Leftrightarrow \quad dE_1 < 0, \quad (10.18)$$

Energie fließt also vom warmen ins kalte Teilsystem, wie intuitiv erwartet.

- Ebenso können wir die Veränderung der Gesamtentropie bei ausschliesslichem Energieaustausch und dem entsprechenden Übergang ins Gleichgewicht betrachten. Für beide Teilsysteme gilt nach der Definition ihrer Temperatur

$$\Leftrightarrow \quad dS_1 = \frac{dE_1}{T_1} = -\frac{dE_2}{T_1} = -\frac{T_2}{T_1} dS_2. \quad (10.19)$$

Für unsere angenommenen Teilsysteme mit  $T_1 > T_2$  und  $dE_1 = -dE_2 < 0$  ist also

$$dS_1 < 0 \quad dS_2 > 0 \quad \text{und} \quad |dS_2| > |dS_1|. \quad (10.20)$$

Die Änderung der Gesamtentropie ist

$$dS = dS_1 + dS_2 = dS_1 \left(1 - \frac{T_1}{T_2}\right) > 0. \quad (10.21)$$

### 10.1.4 Volumen-Austausch

- Als nächstes erlauben wir einen gleichzeitigen Austausch von Energie und Volumen, bei konstanter Teilchenzahl. Damit wird aus (10.12)

$$dS = \frac{\partial S}{\partial E_1} dE_1 - \frac{\partial S}{\partial E_2} dE_1 + \frac{\partial S}{\partial V_1} dV_1 - \frac{\partial S}{\partial V_2} dV_1 \quad (10.22)$$

Analog zur inversen Temperatur definieren wir eine neue Zustandsgrösse  $P$  als

$$\frac{\partial S(E, V, N)}{\partial V} = \frac{P}{T}. \quad (10.23)$$

An dieser Stelle ist es wichtig, dass wir die partielle Ableitung ernst nehmen. Wenn  $S(E, V, N)$  von der Energie, dem Volumen und der Teilchenzahl abhängt, dann sind in dieser Definition sowohl das Volumen als auch die Teilchenzahl konstant. In der Thermodynamik schreibt man oft explizit

$$\left. \frac{\partial S(E, V, N)}{\partial V} \right|_{E, N} = \frac{P}{T}. \quad (10.24)$$

Wie bei der Temperatur überlegen wir uns die anschauliche Bedeutung von  $P$ . Wenn zwei Systeme ihr Volumen austauschen, dann üben sie aufeinander eine Kraft aus. Im Gleichgewicht nach dem Volumenaustausch ist auf der Grenzfläche der Druck gleich, er sollte also unsere Zustandsgröße werden.

- Die maximale Entropie erhalten wir, wenn

$$dS = \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) dE_1 + \left( \frac{P_1}{T_1} - \frac{P_2}{T_2} \right) dV_1 = 0 . \quad (10.25)$$

Bei variabler Energie und variablem Volumen ist das Gleichgewicht also erreicht wenn

$$T_1 = T_2 \quad \text{und} \quad P_1 = P_2 . \quad (10.26)$$

### 10.1.5 Teilchen-Austausch

- Als letzte Zustandsgröße lassen wir die beiden Teilsysteme auch noch ihre Teilchen austauschen,

$$dS = \left( \frac{\partial S}{\partial E_1} - \frac{\partial S}{\partial E_2} \right) dE_1 + \left( \frac{\partial S}{\partial V_1} - \frac{\partial S}{\partial V_2} \right) dV_1 + \left( \frac{\partial S}{\partial N_1} - \frac{\partial S}{\partial N_2} \right) dN_1 \quad (10.27)$$

Wir definieren das chemische Potential als

$$\frac{\partial S(E, V, N)}{\partial N} = -\frac{\mu}{T} \quad (10.28)$$

und erhalten damit die Gleichgewichtsbedingungen

$$T_1 = T_2 \quad \text{und} \quad P_1 = P_2 \quad \text{und} \quad \mu_1 = \mu_2 . \quad (10.29)$$

- Wir betrachten nun zwei Teilsysteme mit gleicher Temperatur auf dem Weg ins Gleichgewicht

$$\begin{aligned} dS &= dS_1 + dS_2 \\ &= -\mu_1 \frac{dN_1}{T} - \mu_2 \frac{dN_2}{T} = (-\mu_1 + \mu_2) \frac{dN_1}{T} > 0 . \end{aligned} \quad (10.30)$$

Wenn das chemische Potential im System 2 größer ist als in System 1, dann bedeutet das

$$\mu_2 > \mu_1 \quad \Leftrightarrow \quad dN_1 = -dN_2 > 0 , \quad (10.31)$$

Teilchen fließen von großem zu kleinem chemischen Potential.

- Wir können den Druck und das chemische Potential statt durch die Entropie auch durch die Energie ausdrücken, wie wir später sehen werden. Allerdings erhalten wir dann partielle Ableitungen, die bei konstanter Entropie ausgeführt werden müssen, was nur auf den ersten Blick eine besser Intuition erlaubt.

### 10.1.6 Zustandsgleichung

- Während die Definition der Temperatur offensichtlich ist, haben wir den Druck und das chemische Potential analog zur Temperatur und basierend auf der Parameter-Abhängigkeit der Zustandsumme des idealen Gases motiviert. Das totale Differenzial der Entropie  $S(E, V, N)$  ist

$$\begin{aligned} dS &= \frac{1}{T}dE + \frac{P}{T}dV - \frac{\mu}{T}dN \\ \Leftrightarrow dE &= TdS - PdV + \mu dN. \end{aligned} \quad (10.32)$$

In dieser Form sehen wir Paare von Variablen, Temperatur–Entropie, Druck–Volumen und chemisches Potential–Teilchenzahl.

- Wir sammeln noch einmal die drei partiellen Ableitungen der Entropie und die entsprechenden Definitionen oder Relationen für das ideale Gas mit (10.7)

$$S(E, V, N) \approx k_B N \left[ \ln \frac{V}{N} + \frac{3}{2} \ln \frac{4\pi m E}{3N} + \frac{5}{2} \right]. \quad (10.33)$$

Die Temperatur ist

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} \approx \frac{3k_B N}{2E} \quad \Leftrightarrow \quad \frac{E}{N} = \frac{3}{2} k_B T. \quad (10.34)$$

Jeder Freiheitsgrad hat die Energie  $k_B T/2$ .

- Wir können für unser ideales Gas auch den Druck nach (10.24) ausrechnen,

$$\frac{P}{T} = \frac{\partial S}{\partial V} \approx \frac{k_B N}{V} \quad \Leftrightarrow \quad PV = Nk_B T. \quad (10.35)$$

Diese Zustandsgleichung ist das ideale Gasgesetz.

- Schliesslich erhalten wir aus der Definition des chemischen Potentials

$$\begin{aligned} -\frac{\mu}{T} &= \frac{\partial S}{\partial N} \\ &\approx k_B \left[ \ln \frac{V}{N} + \frac{3}{2} \ln \frac{4\pi m E}{3N} + \frac{5}{2} \right] + k_B N \frac{\partial}{\partial N} \left[ \ln \frac{V}{N} + \frac{3}{2} \ln \frac{4\pi m E}{3N} \right] \\ &= k_B \left[ \ln \frac{V}{N} + \frac{3}{2} \ln \frac{4\pi m E}{3N} + \frac{5}{2} \right] + k_B N \left[ -\frac{1}{N} - \frac{3}{2N} \right] \\ &= k_B \left[ \ln \frac{V}{N} + \frac{3}{2} \ln \frac{4\pi m E}{3N} \right] \\ \Leftrightarrow \quad \mu &= k_B T \ln \left[ \frac{N}{V} \left( \frac{4\pi m E}{3N} \right)^{-3/2} \right]. \end{aligned} \quad (10.36)$$

## 10.2 Verteilungen

Wir wissen jetzt, wie wir aus der Zustandssumme von großen Systemen die Entropie und aus deren Maximierung die Eigenschaften unseres Systems im Gleichgewicht ausrechnen können. Was uns in der Praxis interessiert, ist vor allem die Wahrscheinlichkeitsverteilung als Funktion der Energie. Hier betrachten wir zwei Berechnungen, eine mit einer eleganten und eine mit einer systematischen Herleitung.

### 10.2.1 Maxwell-Verteilung

- Für unser ideales Gas suchen wir die Verteilungsfunktion

$$P(v_x, v_y, v_z)dv_xdv_ydv_z \quad (10.37)$$

die uns die Wahrscheinlichkeit gibt, ein Teilchen mit einer Geschwindigkeit zwischen  $(v_x, v_y, v_z)$  und  $(v_x + dv_x, v_y + dv_y, v_z + dv_z)$  zu finden.

- Von Maxwell stammt folgende elegante Überlegung: In einem Gas im Gleichgewicht kann die Geschwindigkeitsverteilung nicht von der Richtung der Bewegung abhängen, sondern nur von  $\vec{v}^2$ . Weiterhin sind alle Richtungen unabhängig, also muss die Wahrscheinlichkeit faktorisieren,

$$P(\vec{v}^2) = P(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = P(v_x^2)P(v_y^2)P(v_z^2). \quad (10.38)$$

Die einzige Funktion, die dieser Forderung genügt, ist die Exponentialfunktion, also ist

$$P(\vec{v}^2) \propto \exp\left(-\frac{\vec{v}^2}{2\sigma_v^2}\right). \quad (10.39)$$

Für eine normierbare Verteilung muss  $a > 0$  sein, und die Normierung der Gauss-Wahrscheinlichkeit gibt uns

$$P(\vec{v}^2) = \frac{1}{(2\pi\sigma_v^2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\vec{v}^2}{2\sigma_v^2}\right). \quad (10.40)$$

- Der Mittelwert der Gauss-Verteilung ist  $\bar{v}_x = \bar{v}_y = \bar{v}_z = 0$ , ihre Varianz ist

$$\sigma_v^2 = \overline{v_i^2}. \quad (10.41)$$

Die physikalische Bedeutung der Varianz ist ihre Verbindung zur mittleren kinetische Energie eines Teilchens,

$$\frac{E}{N} = \frac{m}{2} (\overline{v_x^2} + \overline{v_y^2} + \overline{v_z^2}) = \frac{3m}{2} \overline{v_x^2} = \frac{3m}{2} \sigma_v^2. \quad (10.42)$$

Für unser ideales Gas ist die Energie pro Teilchen nach (10.14)

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{2}k_B T \quad \Leftrightarrow \quad \sigma_v^2 = \frac{k_B T}{m}. \quad (10.43)$$

Damit erhalten wir die *Maxwellsche Geschwindigkeitsverteilung*

$$P(\vec{v}^2) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{m\vec{v}^2}{2k_B T}\right] \propto \exp\left[-\frac{E}{k_B T}\right], \quad (10.44)$$

die wir schon in (9.14) erahnt hatten.

## 10.2.2 Boltzmann-Verteilung

- Nachdem wir in (9.14) und (10.44) dieselbe Verteilung für Zustände als Funktion ihrer Energie erhalten hatten, berechnen wir diese Verteilung auch noch systematisch im Rahmen der statistischen Physik. Wir beginnen mit zwei Systemen und der Zustandssumme  $\Omega_{12}(E_{\text{tot}})$  und interessieren uns für die Energieverteilung in System 1. Im Gleichgewicht haben beide Systeme dieselbe Temperatur  $T$ . Am einfachsten ist es, wenn das zweite System bei konstanter Temperatur Energie für einen Austausch zur Verfügung stellt. Dieses typischerweise sehr große System definiert ein Wärmebad, beschrieben durch  $\Omega_2$ .
- Die Besetzung der Energiezustände im System 1 können wir unter der Annahme von Energieerhaltung aus den Zustandssummen des Gesamtsystems und des Wärmebades analog zu (10.2) berechnen

$$p_i \equiv p(E_i) = \frac{\Omega_2(E_{\text{tot}} - E_i)}{\Omega_{12}(E_{\text{tot}})}. \quad (10.45)$$

Wir können mit Hilfe dieser Wahrscheinlichkeiten die mittlere Energie im System 1 berechnen,

$$\langle E \rangle = \sum_i p_i E_i. \quad (10.46)$$

- Wir beginnen wir mit dem Zähler von (10.45) und taylorln für kleine Abweichungen  $E_i \sim \langle E \rangle$

$$\begin{aligned} S_2(E_{\text{tot}} - E_i) &= k_B \ln \Omega_2(E_{\text{tot}} - E_i) \\ &= S_2(E_{\text{tot}} - \langle E \rangle + \langle E \rangle - E_i) \\ &= S_2(E_{\text{tot}} - \langle E \rangle) + (\langle E \rangle - E_i) \frac{\partial S_2}{\partial E} \\ &= S_2(E_{\text{tot}} - \langle E \rangle) + \frac{\langle E \rangle - E_i}{T}. \end{aligned} \quad (10.47)$$

In unserer Näherung ist diese Taylor-Reihe exakt, weil die Temperatur von System 2 und damit die erste Ableitung konstant ist. Wir erhalten damit

$$\begin{aligned} p_i &= e^{S_2(E_{\text{tot}}-E_i)/k_B} \\ &= e^{S_2(E_{\text{tot}}-\langle E \rangle)/k_B} e^{\langle E \rangle/(k_B T)} e^{-E_i/(k_B T)} . \end{aligned} \quad (10.48)$$

- An dieser Stelle können wir ausnutzen dass die einzige Abhängigkeit von  $E_i$  gegeben ist durch

$$p_i \propto e^{-E_i/(k_B T)} , \quad (10.49)$$

Die Normierung der Wahrscheinlichkeit gibt uns dann

$$p_i = \frac{1}{Z} e^{-E_i/(k_B T)} \quad \text{mit} \quad Z = \sum_j e^{-E_j/(k_B T)} . \quad (10.50)$$

Das ist wieder die Boltzmann-Verteilung aus (9.14) und (10.44).

- Zum Schluss verknüpfen wir für unser System 1 noch die Wahrscheinlichkeit für die Energiezustände mit der Anzahl der Zustände bei gegebener Energie  $E$ ,

$$\begin{aligned} p(E) &= \frac{1}{Z} e^{-E/(k_B T)} \times \Omega(E) \\ &= \frac{1}{Z} e^{-E/(k_B T)} e^{S/k_B} \\ &= \frac{1}{Z} e^{-(E-TS)/(k_B T)} \equiv \frac{1}{Z} e^{-F/(k_B T)} . \end{aligned} \quad (10.51)$$

Die wahrscheinlichste Energie ist diejenige, bei der die freie Energie  $F = E - TS$  minimal wird, während die  $T$  durch das Wärmebad vorgegeben ist. Wir können diese Minimierung anhand des idealen Gases illustrieren,

$$\begin{aligned} F(E) &= E - T k_B \ln \Omega \\ &= E - \frac{3k_B T N}{2} \ln E + \text{konst}(E) \\ &\sim \begin{cases} E & (E \rightarrow \infty) \\ -\ln E & (E \rightarrow 0) \end{cases} . \end{aligned} \quad (10.52)$$

Zwischen diesen beiden Grenzfällen wird es in der Tat ein Minimum geben.

# Kapitel 11

## Thermodynamik

Nachdem wir Systeme mit vielen Teilchen mit Hilfe der modernen statistischen Physik verstanden haben, leiten wir nun einige Grundbegriffe der Thermodynamik her. Das beste Beispiel ist typischerweise das ideale Gas. Bei der gesamten Begriffsbildung der Thermodynamik können wir immer auf die exakten Definitionen mit Hilfe der statistischen Physik und speziell der Zustandssumme  $\Omega$  zurückgreifen.

### 11.1 Thermodynamische Beziehungen

#### 11.1.1 Erster Hauptsatz

- Wir wissen aus unserer ersten Betrachtung von äußeren oder Zustandsparametern schon, dass Wechselwirkungen zwischen Systemen entweder als Wärmemenge die Zustandsparameter konstant lassen oder sie als geleistete Arbeit ändern. Das führte uns zur infinitesimalen Relation (9.33)

$$dE = -\delta W + \delta Q, \quad (11.1)$$

mit dem Beispiel  $\delta W = PdV$  aus (9.47)

- Wir können das mit dem Ergebnis aus der statistischen Physik vergleichen, bei der wir aus der Zustandssumme  $\Omega(E, V, N)$  in (10.32) gefunden hatten

$$dE = TdS - PdV + \mu dN. \quad (11.2)$$

Eine Veränderung der Teilchenzahl ist wie die Volumen-Änderung ein Beitrag zur geleisteten Arbeit, wir identifizieren also

$$\delta W = PdV - \mu dN. \quad (11.3)$$

Im Gegensatz dazu ist eine Veränderung der Entropie  $S$  oder der Zustandssumme  $\Omega$  nicht mit einem äußeren Zustandsparameter verknüpft, also

$$\delta Q = T dS . \quad (11.4)$$

Damit bestätigen wir

$$T dS = \delta Q = dE + \delta W , \quad (11.5)$$

als den *ersten Hauptsatz der Thermodynamik* in infinitesimaler Form, also für quasistatische Zustandsänderungen

- Nimmt die Energie eines Systems ab, dann verringert sich typischerweise das zugängliche Phasenraumvolumen. In der Thermodynamik normieren wir die Entropie so, dass  $S \rightarrow 0$  für  $E \rightarrow 0$ . Wir hatten  $k_B$  schon so definiert, dass dies  $T \rightarrow 0$  entspricht. Die Verknüpfung

$$S \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad T \rightarrow 0 \quad (11.6)$$

bezeichnet man als den *dritten Hauptsatz der Thermodynamik*.

- Wird in einem Prozess keine Wärme ausgetauscht, heißt er *adiabatisch*. Ist dies bei einem quasistatischen Prozess der Fall, ist wegen (11.5) auch  $dS = 0$ . Solche endlichen, adiabatischen und quasistatischen Prozesse sind reversibel. Die Entropie kann auch bei adiabatischen Prozessen aber zunehmen, wenn der Prozess *nicht* quasistatisch geführt wird.
- Größen wie die Masse, die Energie, die Entropie und das Volumen addieren sich, wenn zwei Systeme im Gleichgewicht zueinander kombiniert werden. Sie heißen *extensiv*. *Intensive* Größen bleiben gleich, wenn die beiden Systeme kombiniert werden. Dazu gehören die Massendichte, die Temperatur und der Druck.

## 11.2 Ideales Gas

### 11.2.1 Zustandsgleichung

- Wir haben für ein ideales Gas die Zustandsgleichung in (10.35) berechnet,

$$\frac{P}{T} = \frac{\partial S}{\partial V} = \frac{Nk_B}{V} \quad \Rightarrow \quad PV = Nk_B T . \quad (11.7)$$

Ebenso ist die Temperatur nach (10.34)

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} \approx \frac{3k_B N}{2E} \quad \Leftrightarrow \quad E = \frac{3}{2} Nk_B T . \quad (11.8)$$

Die Energie eines idealen Gases ist also eine Funktion allein der Temperatur.

- Alternativ können wir die Zustandsgleichung (11.7) als experimentell gegeben ansehen und Schlüsse über ideale Gase ziehen. Wir schreiben anders als bisher die Entropie als Funktion der Messgrößen Temperatur und Volumen,

$$dS(T, V) = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V dT + \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T dV. \quad (11.9)$$

Hier nutzen wir die zusätzliche Notation zu den ohnehin schon eindeutigen partiellen Ableitungen benutzt. Mit dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik gilt ausserdem

$$\begin{aligned} dS(T, V) &= \frac{dE(V, T)}{T} + \frac{P dV}{T} \\ &= \frac{1}{T} \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V dT + \frac{1}{T} \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T dV + \frac{P dV}{T} \\ &= \frac{1}{T} \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V dT + \left(\frac{P}{T} + \frac{1}{T} \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T\right) dV \end{aligned} \quad (11.10)$$

Wir können also die partiellen Ableitungen der Entropie ablesen,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V &= \frac{1}{T} \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V \\ \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T &= \frac{P}{T} + \frac{1}{T} \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T = \frac{Nk_B}{V} + \frac{1}{T} \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T, \end{aligned} \quad (11.11)$$

wenn wir im letzten Schritt die Zustandsgleichung verwenden.

- Ausserdem müssen die gemischten Ableitungen der Entropie vertauschen,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 S}{\partial T \partial V} &= \frac{\partial}{\partial T} \frac{\partial S}{\partial V} = \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{Nk_B}{V} + \frac{1}{T} \frac{\partial E}{\partial V} \right) = -\frac{1}{T^2} \frac{\partial E}{\partial V} + \frac{1}{T} \frac{\partial^2 E}{\partial T \partial V} \\ &\stackrel{!}{=} \frac{\partial}{\partial V} \frac{\partial S}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial V} \left( \frac{1}{T} \frac{\partial E}{\partial T} \right) = \frac{1}{T} \frac{\partial^2 E}{\partial T \partial V}, \end{aligned} \quad (11.12)$$

und damit gilt

$$\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T = 0. \quad (11.13)$$

Die Energie eines thermodynamischen Systems mit der gemessenen Zustandsgleichung (11.7) kann daher nicht vom Volumen abhängen. Aus der Zustandsgleichung und den thermodynamischen Gesetzen schließen wir also unsere vorherige Annahme, dass die Teilchen des Systems nur durch direkte Stöße wechselwirken können und nicht zum Beispiel durch langreichweitige Kräfte.

### 11.2.2 Wärmekapazität

- Betrachten wir Systeme mit konstanter Teilchenzahl und  $\delta W = PdV$ , dann besagt der erste Hauptsatz, dass sich die Energie eines Systems durch Wärmezufuhr vergrößert. Wir wissen auch, dass Wärmezufuhr Temperaturerhöhung bedeutet. Die Aufnahmefähigkeit eines Systems für Wärme wird durch die *Wärmekapazität* beschrieben,

$$C_x := \left( \frac{\delta Q}{dT} \right)_x . \quad (11.14)$$

- In dieser Notation ist  $x$  ein äußerer Zustandsparameter, der konstant gehalten wird. Die spezifische Wärme  $c_x$  als Materialgröße der erhalten wir, indem wir  $C_x$  entweder durch die Molzahl  $\nu$  oder die Masse  $m$  teilen,

$$c_x = \frac{C_x}{\nu} \quad \text{oder} \quad c_x = \frac{C_x}{m} , \quad (11.15)$$

mit den Einheiten  $\text{erg K}^{-1} \text{mol}^{-1}$  im ersten und  $\text{erg K}^{-1} \text{g}^{-1}$ .

- Mit (11.14) können wir berechnen, welche Temperatur sich einstellt, wenn zwei gemeinsam isolierte Systeme bei konstantem  $V$  in thermischen Kontakt gebracht werden,

$$0 = Q_1 + Q_2 = m_1 \int_{T_1}^{T_m} c_{V1}(T) dT + m_2 \int_{T_2}^{T_m} c_{V2}(T) dT , \quad (11.16)$$

wenn  $c_V$  die spezifische Wärme pro Masse bei konstantem Teilvolumen ist. Wenn  $c_V$  von der Temperatur unabhängig ist, dann können wir die beiden Integranden aufintegrieren und erhalten die Mischungstemperatur,

$$\begin{aligned} 0 &= m_1 c_{V1}(T_m - T_1) + m_2 c_{V2}(T_m - T_2) \\ \Leftrightarrow T_m &= \frac{m_1 c_{V1} T_1 + m_2 c_{V2} T_2}{m_1 c_{V1} + m_2 c_{V2}} . \end{aligned} \quad (11.17)$$

- Eine veränderte Wärmemenge  $\delta Q$  hatten wir als unvollständiges Differential identifiziert. Das Differential der Entropie muss hingegen bei quasistatischen Zustandsänderungen vollständig sein,

$$S_f - S_i = \int_i^f dS = \int_i^f \frac{\delta Q}{T} . \quad (11.18)$$

Der Faktor  $1/T$  ist also ein integrierender Faktor für  $\delta Q$ . Analog zu (11.16) können wir die Entropieänderung für unser System

berechnen. Bei einer quasistatischen Temperaturänderung von  $T_i$  zu  $T_f$  gilt bei konstantem Zustandsparameter  $x$

$$S_f - S_i = \int_i^f \frac{dQ}{T} = \int_{T_i}^{T_f} C_x \frac{dT}{T} = C_x \ln \frac{T_f}{T_i}, \quad (11.19)$$

falls die Wärmekapazität  $C_x$  temperaturunabhängig ist.

- Für die spezifische Wärme pro Mol bei konstantem Volumen,  $c_V$ , erhalten wir aus dem ersten Hauptsatz

$$\begin{aligned} c_V &= \frac{1}{\nu} \left( \frac{dQ}{dT} \right)_V = \frac{1}{\nu} \left( \frac{dE + PdV}{dT} \right)_V = \frac{1}{\nu} \frac{\partial E}{\partial T} \\ \Rightarrow \quad dE &= \frac{\partial E}{\partial T} dT = \nu c_V dT, \end{aligned} \quad (11.20)$$

wenn die Energie nur von der Temperatur abhängt. Wenn wir stattdessen den Druck konstant halten, dann kann sich das Volumen ändern und die spezifische Wärme pro Mol bei konstantem Druck ist

$$\begin{aligned} c_P &= \frac{1}{\nu} \left( \frac{dE + PdV}{dT} \right)_P \quad (11.21) \\ &= \frac{1}{\nu} \frac{dE}{dT} + \frac{P}{\nu} \left( \frac{dV}{dT} \right)_P = c_V + \frac{P}{\nu} \left( \frac{d}{dT} \frac{Nk_B T}{P} \right)_P = c_V + \frac{Nk_B}{\nu} \\ &= c_V + R \quad \text{mit} \quad R := \frac{Nk_B}{\nu} = N_A k_B = 8.31 \times 10^7 \frac{\text{erg}}{\text{mol K}} \end{aligned}$$

wegen der Zustandsgleichung (11.7) und mit der so definierten *Gaskonstanten*  $R$ . Die spezifische Wärme bei konstantem Druck ist größer als bei konstantem Volumen, weil das Gas bei konstantem Druck außer einer Temperaturerhöhung auch mechanische Arbeit verrichten kann, indem es sein Volumen vergrößert.

- Wir können die beiden Wärmekapazitäten aus der Zustandssumme (10.7) ausrechnen und nutzen

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} \approx \frac{3k_B N}{2E} \quad \Leftrightarrow \quad E(T) = \frac{3}{2} Nk_B T. \quad (11.22)$$

Nun ist nach (11.20) und mit  $dV = 0$

$$c_V = \frac{1}{\nu} \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{3}{2} \frac{Nk_B}{\nu} = \frac{3}{2} R \quad \Rightarrow \quad c_P = \frac{5}{2} R. \quad (11.23)$$

### 11.2.3 Adiabatische Expansion

- Wenn ein ideales Gas im Kontakt mit einem Wärmereservoir expandiert, dann bleibt seine Temperatur konstant, also gilt aufgrund der Zustandsgleichung (11.7)

$$PV = Nk_B T = \text{konst.} \quad \Leftrightarrow \quad P \propto \frac{1}{V}. \quad (11.24)$$

Anders verläuft die Expansion, wenn das ideale Gas thermisch isoliert ist. Sie heisst adiabatisch und bedeutet in der Form mit den spezifischen Wärmen

$$0 = \delta Q = dE + PdV = \nu c_V dT + PdV . \quad (11.25)$$

Die Zustandsgleichung sagt außerdem

$$d(PV) = VdP + PdV = Nk_B dT = \nu R dT . \quad (11.26)$$

Eliminieren wir  $\nu dT$  zwischen den diesen beiden Gleichungen, dann folgt

$$\begin{aligned} \frac{1}{R} (VdP + PdV) &= -\frac{1}{c_V} PdV \\ \Leftrightarrow \frac{c_V}{R} VdP &= -\left(1 + \frac{c_V}{R}\right) PdV = -\frac{c_P}{R} PdV , \end{aligned} \quad (11.27)$$

mit (11.21). Trennung der Variablen und Integration führt zu

$$\begin{aligned} \frac{dP}{P} &= -\frac{c_P}{c_V} \frac{dV}{V} \\ \Leftrightarrow d \log P &= d \log V^{-c_P/c_V} \\ \Rightarrow P &\propto V^{-\gamma} \quad \text{mit} \quad \gamma := \frac{c_P}{c_V} = \frac{5}{3} \end{aligned} \quad (11.28)$$

- Über die Zustandsgleichung  $PV = \nu RT$  erhalten wir auch den Zusammenhang zwischen dem Volumen und der Temperatur,

$$PV^\gamma = (PV)V^{\gamma-1} = \nu RT V^{\gamma-1} = \text{konst.} \quad \Rightarrow \quad T \propto \frac{1}{V^{\gamma-1}} \quad (11.29)$$

für eine adiabatische Expansion oder Kompression.

### 11.2.4 Nicht-ideale Gase

- Betrachten wir jetzt ein Gas aus zweiatomigen Molekülen. Zu den drei Freiheitsgraden der Translation kommen zwei Freiheitsgrade der Rotation hinzu, denn die Rotation um die Verbindungsachse nimmt für punktförmige Atome keine Energie auf. Ausserdem sind Schwingungen der beiden Atome gegeneinander möglich, also wird  $f = 6N$ . Damit wird die Entropie (10.7)

$$S(E, V, N) \approx k_B N \left[ 2 \ln \frac{V}{N} + \frac{6}{2} \ln \frac{4\pi m E}{6N} + \frac{7}{2} \right] . \quad (11.30)$$

Unsere Formeln ändern sich dadurch, zum Beispiel wird (11.22)

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{3Nk_B}{E} \quad \Leftrightarrow \quad E = 3Nk_B T . \quad (11.31)$$

Damit erhöhen sich die spezifischen Wärmen auf

$$c_V = 3R \quad \text{und} \quad c_P = c_V + R = 4R, \quad (11.32)$$

und der Adiabatenindex verringert sich auf

$$\gamma = \frac{c_P}{c_V} = \frac{4}{3}. \quad (11.33)$$

Die Anzahl der Freiheitsgrade hängt streng genommen davon ab, ob die Rotations- und die Vibrationsfreiheitsgrade angeregt werden können. Bei niedriger Temperatur ist das nicht der Fall, so dass  $c_V$  von  $3R/2$  über  $5R/2$  zu  $3R$  zunimmt.

- Wenn sich die Gasteilchen mit annähernd Lichtgeschwindigkeit  $c$  bewegen, dann ändert sich der Zusammenhang zwischen Impuls und kinetischer Energie,

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad \longrightarrow \quad E = cp. \quad (11.34)$$

Damit ändert sich auch das Skalieren in (9.25) und (10.3),

$$\Omega \propto V^{f/3} E^{f/2} \quad \longrightarrow \quad \Omega \propto V^{f/3} E^f. \quad (11.35)$$

Die Entropie wird entsprechend

$$\begin{aligned} S(E, V, N) &= \frac{k_B f}{3} \ln V + k_B f \ln E + \dots \\ \Rightarrow \frac{1}{T} &= \frac{k_B f}{E} \quad \Leftrightarrow \quad E = f k_B T. \end{aligned} \quad (11.36)$$

Daraus erhalten wir die spezifischen Wärmen und den Adiabatenindex

$$c_V = 3R \quad c_P = 4R \quad \Rightarrow \quad \gamma = \frac{4}{3}. \quad (11.37)$$

Dehnt sich also ein Gemisch aus einem einatomigen, nichtrelativistischen idealen Gas und Photonen adiabatisch aus, dann fällt nach (11.29) die Temperatur des Gases schneller als die Temperatur der Photonen,

$$T_{\text{Gas}} \propto V^{-2/3} \quad T_\gamma \propto V^{-1/3}. \quad (11.38)$$

Ohne Wechselwirkung zwischen Gas und Photonen hat das Gemisch also zwei verschiedene Temperaturen.

## 11.3 Thermodynamische Funktionen

### 11.3.1 Legendre-Transformationen

- In der Thermodynamik sind typische Variablen der Energie durch den ersten Hauptsatz gegeben,

$$\begin{aligned} dE &= T dS - P dV = \left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_V dS + \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_S dV \\ \Leftrightarrow \quad \left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_V &= T \quad \text{und} \quad \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_S = -P. \end{aligned} \quad (11.39)$$

Wenn  $dE$  ein vollständiges Differential ist, dann sind diese partiellen Ableitungen unabhängig und wir finden

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 E}{\partial V \partial S} &= \frac{\partial^2 E}{\partial S \partial V} \\ \Leftrightarrow \quad \left(\frac{\partial}{\partial V}\right)_S \left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_V &= \left(\frac{\partial}{\partial S}\right)_V \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_S \\ \Leftrightarrow \quad \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S &= -\left(\frac{\partial P}{\partial S}\right)_V. \end{aligned} \quad (11.40)$$

- Statistisch oder experimentell motiviert interessieren uns die Variablentransformationen  $E(V) \rightarrow E'(P)$  und  $E(S) \rightarrow E'(T)$ . Beide haben die Form

$$f(x) \rightarrow g(u) \quad \text{mit} \quad u = \pm \frac{df(x)}{dx}, \quad (11.41)$$

wobei wir erst einmal das Minuszeichen ignorieren. Wenn wir symmetrische totale Differentiale von  $f(x)$  und  $g(u)$  annehmen,

$$df = \frac{df(x)}{dx} dx = u dx \quad \text{und} \quad dg = \frac{dg(u)}{du} du = -x du, \quad (11.42)$$

dann hat unsere neue Funktion die Form

$$\begin{aligned} dg &= -x du = u dx - (u dx + x du) = df - d(ux) \\ \Rightarrow \quad g(u) &= f[x(u)] - ux(u) + \text{konst.} \end{aligned} \quad (11.43)$$

Sie heißt *Legendre-Transformierte* von  $f(x)$ . Wenn sie nicht eindeutig bestimmt ist, wird die Legendre-Transformation allgemein bestimmt durch

$$g(u) = \inf_x \{f[x(u)] - ux(u)\}. \quad (11.44)$$

- Als Beispiel betrachten wir

$$\begin{aligned} f(x) = x^2 + 1 &\Rightarrow u(x) = 2x \Rightarrow x(u) = \frac{u}{2} \\ \Rightarrow g(u) &= f\left(\frac{u}{2}\right) - \frac{u^2}{2} = 1 - \frac{u^2}{4}. \end{aligned} \quad (11.45)$$

und

$$\begin{aligned} f(x) = \frac{x^3}{6} - \frac{x^2}{2} &\Rightarrow u(x) = \frac{x^2}{2} - x \\ &\Rightarrow x(u) = 1 \pm \sqrt{1 + 2u}. \end{aligned} \quad (11.46)$$

Die Legendre-Transformierte von  $f(x)$  ist im zweiten Fall durch die kleinere der beiden Lösungen  $x(u)$  definiert.

- Eine Legendre-Transformation war uns schon bei der Hamilton-Formulierung der klassischen Mechanik begegnet, nämlich

$$H(q, p) = \dot{q}p - L(q, \dot{q}) \quad \text{mit} \quad p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}. \quad (11.47)$$

### 11.3.2 Freie Energie, Enthalpie und freie Enthalpie

- Wir konstruieren jetzt eine Kette von Legendre-Transformationen der Energie, als erstes die aus der statistischen Physik bekannte *freie Energie*, für die wir die Entropie durch die Temperatur ersetzen

$$F(T, V) = E(S, V) - TS \quad \text{mit} \quad T = \left( \frac{\partial E}{\partial S} \right)_V. \quad (11.48)$$

Ihr vollständiges Differential ist

$$\begin{aligned} dF(T, V) &= dE - d(TS) \\ &= TdS - PdV - SdT - TdS = -PdV - SdT, \end{aligned} \quad (11.49)$$

woraus wir

$$\left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = -P \quad \text{und} \quad \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = -S \quad (11.50)$$

erhalten. Gleichsetzen der gemischten zweiten Ableitungen führt uns auf

$$\frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V} = \frac{\partial^2 F}{\partial V \partial T} \quad \Leftrightarrow \quad \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_V = \left( \frac{\partial S}{\partial V} \right)_T. \quad (11.51)$$

- Alternativ können, wie schon erwähnt, das Volumen durch den Druck ersetzen und erhalten die *Enthalpie*

$$H(S, P) = E(S, V) + PV \quad \text{mit} \quad P = - \left( \frac{\partial E}{\partial V} \right)_S. \quad (11.52)$$

In diesem Fall ist das positive Vorzeichen physikalisch sinnvoll. Das vollständige Differential der Enthalpie ist

$$\begin{aligned} dH &= dE + d(PV) \\ &= TdS - PdV + VdP + PdV = TdS + VdP, \end{aligned} \quad (11.53)$$

also zunächst

$$\left(\frac{\partial H}{\partial S}\right)_P = T \quad \text{und} \quad \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_S = V. \quad (11.54)$$

Wenn  $dH$  ein vollständiges Differential ist, müssen wieder Beziehungen zwischen den partiellen Ableitungen der Enthalpie gelten. Wir identifizieren die zweiten Ableitungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 H}{\partial S \partial P} &= \frac{\partial^2 H}{\partial P \partial S} \\ \Leftrightarrow \left(\frac{\partial}{\partial S}\right)_P \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_S &= \left(\frac{\partial}{\partial P}\right)_S \left(\frac{\partial H}{\partial S}\right)_P \\ \Leftrightarrow \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_P &= \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_S. \end{aligned} \quad (11.55)$$

- Schließlich suchen wir eine letzte Größe als Funktion von Temperatur und Druck. Eine Legendre-Transformation der freien Energie führt uns auf die *freie Enthalpie*

$$\begin{aligned} G(T, P) &= F(T, V) + PV \\ &= E(S, V) - TS + PV \quad \text{mit} \quad P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T, \end{aligned} \quad (11.56)$$

mit dem vollständigen Differential

$$\begin{aligned} dG &= dF + VdP + PdV \\ &= -PdV - SdT + VdP + PdV = VdP - SdT. \end{aligned} \quad (11.57)$$

Die übliche Gleichsetzung der gemischten zweiten Ableitungen führt mit

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P = -S \quad \text{und} \quad \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T = V \quad (11.58)$$

auf

$$\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P. \quad (11.59)$$

### 11.3.3 Maxwell-Relationen

- Fassen wir zusammen: Wir hatten anfänglich Systeme durch ihre Energie  $E$  gekennzeichnet, mit dem Volumen  $V$  als äußeren Parameter. Die Entropie  $S(E, V)$  ist das logarithmische Maß dafür, wie viele Zustände dem System unter Vorgabe von  $E$  und  $V$  (und  $N$ ) zugänglich sind. Für quasistatische Zustandsänderungen waren wir damit auf den ersten Hauptsatz gekommen, indem wir  $dQ$  und  $dW$  durch die vollständigen Differentiale  $TdS$  und  $PdV$  ersetzt hatten.



James Clerk Maxwell

- Ausgehend von der Energie  $E(S, V)$ , thermodynamisch eine Funktion der Entropie und des Volumens, haben wir drei Legendre-Transformationen basierend auf  $S \rightarrow T$  oder  $V \rightarrow P$  konstruiert

$$\begin{aligned} \text{Energie} & \quad E(S, V) \\ \text{freie Energie} & \quad F(T, V) = E(S, V) - TS \\ \text{Enthalpie} & \quad H(S, P) = E(S, V) + PV \\ \text{freie Enthalpie} & \quad G(T, P) = F(T, V) + PV = E(S, V) - TS + PV. \end{aligned}$$

Funktionen der Temperatur heißen “frei”; Funktionen des Drucks heißen “Enthalpie”. Die jeweiligen vollständigen Differentiale sind

$$\begin{aligned} dE &= TdS - PdV \\ dF &= -SdT - PdV \\ dH &= TdS + VdP \\ dG &= -SdT + VdP. \end{aligned} \quad (11.60)$$

Wenn alle diese Differentiale vollständig sind, dann gelten die *Maxwell-Relationen*

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S &= -\left(\frac{\partial P}{\partial S}\right)_V & \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_S &= \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_P \\ \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T &= \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V & \left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T &= -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P. \end{aligned} \quad (11.61)$$

Diese Relationen folgen letztendlich daraus, dass die Entropie eine Funktion ist, die den Zustand eines Systems kennzeichnet und deren Differential deshalb vollständig sein muss.

# Kapitel 12

## Kreisprozesse

### 12.1 Carnot-Wirkungsgrad



Nicolas Léonard Sadi Carnot

- Mechanische Arbeit in Wärme umzusetzen, ist einfach: Reibung ist dafür das alltäglichste Beispiel. Aber ist es auch möglich, Wärme in mechanische Arbeit zu verwandeln?

Stellen wir uns ein Wärmereservoir mit  $T_1$  vor, aus dem wir unbegrenzt Wärme beziehen können. Wir möchten eine Wärmemenge  $|Q_1|$  in mechanische Arbeit  $W$  verwandeln. Die gesamte Vorrichtung sei abgeschlossen. Wenn das Wärmereservoir die Wärmemenge  $Q_1$  verliert, dann sinkt nach (11.4) seine Entropie um

$$\Delta S_1 = \frac{Q_1}{T_1} = -\frac{|Q_1|}{T_1}. \quad (12.1)$$

Wir müssen also die Entropie des Wärmereservoirs verringern was nach dem *zweiten Hauptsatz* für ein abgeschlossenes Systems unmöglich ist. Eine einfache Umwandlung von Wärme in mechanische Arbeit ist also ausgeschlossen.

- Wir können aber diese Entropieverminderung durch eine Entropieerhöhung anderswo kompensieren. Wir nutzen also ein zweites Wärmereservoir mit  $T_2 < T_1$ . Mit  $Q_2 > 0$  ermöglicht es uns

$$\Delta S = \Delta S_2 + \Delta S_1 = \frac{Q_2}{T_2} - \frac{|Q_1|}{T_1} \geq 0. \quad (12.2)$$

- Jetzt können wir mechanische Arbeit abzuzweigen. Wir stellen uns eine zyklisch arbeitende Maschine vor, die Wärme  $Q_1$  aus dem wärmeren Reservoir entnimmt, mechanischer Arbeit  $W$  verrichtet, und dem kälteren Reservoir die Wärme  $Q_2$  zuführt. Wenn sie am Ende in den Ausgangspunkt zurückkehrt dann fordert Energieerhaltung

$$|Q_1| = -Q_1 = Q_2 + W. \quad (12.3)$$

Die maximale Arbeit folgt aus (12.2)

$$\begin{aligned}\Delta S &= \frac{Q_2}{T_2} - \frac{|Q_1|}{T_1} = \frac{|Q_1| - W}{T_2} - \frac{|Q_1|}{T_1} \geq 0 \\ &\Leftrightarrow |Q_1| \left(1 - \frac{T_2}{T_1}\right) \geq W \\ &\Leftrightarrow \frac{W}{|Q_1|} \leq 1 - \frac{T_2}{T_1}. \quad (12.4)\end{aligned}$$

Dies ist der maximale, *Carnot-Wirkungsgrad* einer quasistatischen Wärmekraftmaschine.

## 12.2 Carnot-Prozess

- Wie können quasistatische Kreisprozesse realisiert werden? Wir können zum Beispiel zwei isotherme und zwei adiabatischen Zustandsänderungen für ein ideales Gas verknüpfen. Im  $P$ - $V$ -Diagramm bedeutet das nach (11.28)

$$\begin{aligned}(PV)_{\text{isoth}} &= C_{\text{isoth}} & (PV^\gamma)_{\text{adiab}} &= C_{\text{adiab}} \\ \Leftrightarrow P &= \frac{C_{\text{isoth}}}{V} & P &= \frac{C_{\text{adiab}}}{V^\gamma} = \frac{C_{\text{adiab}}}{V^{5/3}}. \quad (12.5)\end{aligned}$$

Bei einem idealen einatomigen Gas ist  $\gamma = 5/3$ . Die Adiabaten verlaufen also steiler als die Isothermen.

- Im Kreisprozess wird zunächst, ausgehend von  $(P_1, V_1)$ , isotherm die Wärmemenge  $|Q_1|$  aus dem wärmeren Reservoir mit  $T_1$  aufgenommen. Das führt zu einer isothermen Expansion zu  $V_2 > V_1$ , zusammen mit der Druckverringern auf  $P_2 = P_1 V_1 / V_2$ .

Danach wird die Maschine vom Reservoir 1 isoliert und adiabatisch auf die Temperatur  $T_2 < T_1$  des kühleren Reservoirs gebracht. Dabei expandiert sie weiter auf das Volumen  $V_3 > V_2$ , wobei der Druck auf  $P_3 = P_2 (V_2 / V_3)^\gamma$  abnimmt. Bei diesem Vorgang verrichtet sie Arbeit, etwa indem sie einen Kolben verschiebt.

Nun wird sie in thermischen Kontakt mit dem Reservoir 2 gebracht und gibt dabei die Wärmemenge  $Q_2$  an das Reservoir ab. Ihr Volumen verringert sich auf  $V_4 < V_3$ , und ihr Druck steigt auf  $P_4 = P_3 V_3 / V_4$ .

Schließlich wird sie auch vom kühleren Reservoir 2 isoliert und adiabatisch auf die Temperatur  $T_1$  gebracht, wobei das Volumen wieder auf  $V_1$  abnimmt und der Druck auf  $P_1$  steigt. Das kann geschehen, indem der Kolben wieder in den Zylinder geschoben wird.

- Da die Energie eines idealen Gases nur von seiner Temperatur abhängt, kann sie sich im ersten und im dritten Schritt nicht ändern, weil beide Prozesse isotherm sind. In den adiabatischen Schritten wird dagegen keine Wärme aufgenommen, die Energieänderung ist also gleich der verrichtete Arbeit,

$$\begin{aligned}\Delta E_{1\rightarrow 2} &= 0 = \Delta E_{3\rightarrow 4} \\ \Delta E_{2\rightarrow 3} &= -W_{2\rightarrow 3} \\ \Delta E_{4\rightarrow 1} &= -W_{4\rightarrow 1} .\end{aligned}\quad (12.6)$$

Da die Energie nur von  $T$  abhängt, muss längs der Adiabaten  $\Delta E_{2\rightarrow 3} = -\Delta E_{4\rightarrow 1}$  gelten, und damit

$$W_{2\rightarrow 3} = -W_{4\rightarrow 1} . \quad (12.7)$$

Entlang der beiden Isothermen können wir wegen  $\delta W = PdV$  die Arbeit integrieren,

$$\begin{aligned}W_{1\rightarrow 2} &= \int_{V_1}^{V_2} \frac{P_1 V_1}{V} dV = \nu RT_1 \ln \frac{V_2}{V_1} , \\ W_{3\rightarrow 4} &= \nu RT_2 \ln \frac{V_4}{V_3} \\ W &= W_{1\rightarrow 2} + W_{3\rightarrow 4} = \nu R \left( T_1 \ln \frac{V_2}{V_1} + T_2 \ln \frac{V_4}{V_3} \right) .\end{aligned}\quad (12.8)$$

- Die dazu aufgenommene Wärmemenge ist  $|Q_1| = W_{1\rightarrow 2}$ , und damit der Wirkungsgrad

$$\eta = \frac{W}{|Q_1|} = \frac{W}{W_{1\rightarrow 2}} = 1 + \frac{T_2 \ln(V_4/V_3)}{T_1 \ln(V_2/V_1)} . \quad (12.9)$$

Schließlich wissen wir aus (11.28), dass die Volumina bei einer adiabatischen Expansion wie  $TV^{\gamma-1}$  skalieren,

$$\frac{V_4}{V_1} = \left( \frac{T_1}{T_2} \right)^{1/(\gamma-1)} = \frac{V_3}{V_2} \quad \Rightarrow \quad \ln \frac{V_2}{V_1} = -\ln \frac{V_4}{V_3} . \quad (12.10)$$

Der Wirkungsgrad ist also identisch mit dem Carnot-Wirkungsgrad  $\eta = 1 - T_2/T_1$  in (12.4).

## 12.3 Der Otto-Prozess

- Ein weiterer Kreisprozess von erheblicher Bedeutung ist der *Otto-Prozess*, der in Ottomotoren (näherungsweise) verwirklicht ist. Hier wechseln adiabatische Prozesse mit isochoren ab, bei denen das Volumen konstant bleibt. Ausgehend vom Punkt  $(P_1, V_1)$  im  $P$ - $V$ -Diagramm und von der Temperatur  $T_1$  wird

zunächst adiabatisch expandiert, sodass der Druck auf  $P_2 = P_1(V_1/V_2)^\gamma$  und die Temperatur auf  $T_2 = T_1(V_1/V_2)^{\gamma-1}$  sinken. Dann wird isochor abgekühlt, wodurch eine Wärmemenge  $Q_2$  abgegeben wird. Dadurch sinkt der Druck weiter auf  $P_3 = P_2(T_3/T_2)$ . Nun wird adiabatisch komprimiert, wodurch der Druck  $P_4 = P_3(V_3/V_4)^\gamma = P_3(V_2/V_1)^\gamma$  und die Temperatur  $T_4 = T_3(V_3/V_4)^{\gamma-1} = T_3(V_2/V_1)^{\gamma-1}$  erreicht werden. Abschließend wird isochor erwärmt, wobei die Wärmemenge  $|Q_1|$  aufgenommen wird. Dadurch erreichen Druck und Temperatur wieder ihre Ausgangswerte  $P_1 = P_4(T_1/T_4)$ .

- Bei den beiden isochoren Schritten wird natürlich keine Arbeit verrichtet, sodass die aufgenommene bzw. abgegebene Wärme gerade gleich der jeweiligen Änderung der Energie ist. Dadurch ändern sich die Temperaturen um

$$T_3 - T_2 = \frac{-|Q_2|}{C_V}, \quad T_1 - T_4 = \frac{|Q_1|}{C_V}. \quad (12.11)$$

Bei den beiden adiabatischen Schritten wird keine Wärme ausgetauscht, sodass dort

$$W_{1 \rightarrow 2} = -\Delta E_{1 \rightarrow 2} = C_V(T_1 - T_2), \quad W_{3 \rightarrow 4} = C_V(T_3 - T_4) \quad (12.12)$$

gelten. Dabei haben wir verwendet, dass die Energie eines idealen Gases nicht vom Volumen abhängt, sodass (11.20) gilt. Der Wirkungsgrad ist demnach

$$\eta = \frac{W}{|Q_1|} = \frac{T_1 - T_2 + T_3 - T_4}{T_1 - T_4} = 1 - \frac{T_2 - T_3}{T_1 - T_4}. \quad (12.13)$$

Wie oben besprochen, sind die Temperaturverhältnisse an den Enden der Adiabaten durch

$$\frac{T_2}{T_1} = \left(\frac{V_1}{V_2}\right)^{\gamma-1} = \frac{T_3}{T_4} \quad (12.14)$$

gegeben. Daraus erhalten wir

$$T_2 - T_3 = T_2 \left(1 - \frac{T_4}{T_1}\right), \quad (12.15)$$

was es erlaubt, den Wirkungsgrad in der Form

$$\eta = 1 - \frac{T_2}{T_1} = 1 - \left(\frac{V_1}{V_2}\right)^{\gamma-1} =: 1 - v^{1-\gamma} \quad (12.16)$$

zu schreiben. Daher ist der maximale Wirkungsgrad im Otto-Prozess durch die Kompression  $v := V_2/V_1$  bestimmt. Wenn  $\gamma = 5/3$  und  $v = 5$  sind, ist  $\eta = 66\%$ . Er steigt, wenn  $v$  und  $\gamma$  zunehmen.