29 Kanonische Transformationen

29.a Variationsprinzip

Wir hatten das Hamiltonsche Variationsprinzip in Abschnitt 15.a bereits kennengelernt. Dabei war die Wirkung $I = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L} \mathrm{d}t$ extremal bei Variation der q_i, wenn wir diese an den Grenzen festhalten. Wir zeigen nun Entsprechendes für

$$I = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L} \mathrm{d}t = \int_{t_1}^{t_2} (\sum_i p_i \dot{q}_i - \mathcal{H}) \mathrm{d}t, \tag{29.1}$$

wobei wir die q_i und p_i variieren und die q_i an den Grenzen festhalten. Die Variation ergibt

$$\delta I = \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t (\sum_i \delta p_i \dot{q}_i + \sum_i p_i \delta \dot{q}_i - \sum_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \delta q_i - \sum_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \delta p_i). \tag{29.2}$$

Unter Verwendung von

$$\int \mathrm{d}t \, p_i \delta \dot{q}_i = p_i \delta q_i - \int \mathrm{d}t \, \dot{p}_i \delta q_i \tag{29.3}$$

folgt schließlich

$$\delta I = \sum_i p_i \delta q_i |_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \sum_i (-\dot{p}_i - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}) \delta q_i + \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \sum_i (\dot{q}_i - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}) \delta p_i. \tag{29.4}$$

Erlaubt man sowohl die Variation von q_i wie auch von p_i, so findet man, dass die Wirkung bei Erfüllung der Bewegungsgleichungen extremal wird, wenn man die q_i an den Grenzen $t = t_1$ und $t = t_2$ festhält. Ähnlich kann man zeigen, dass

$$I' = \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t (- \sum_i \dot{p}_i q_i - \mathcal{H}) \tag{29.5}$$

unter Variation der qs und ps extremal wird, wenn man die p_i an den Grenzen festhält, da dann an Stelle von $\sum_i p_i \delta q_i |_{t_1}^{t_2}$ die Summe $- \sum_i q_i \delta p_i |_{t_1}^{t_2}$ tritt.

29.b Die Transformation

Eine Transformation

$$Q_i = Q_i(q, p, t), \quad P_i = P_i(q, p, t) \tag{29.6}$$

heißt kanonisch, wenn sich die Bewegungsgleichungen aus einer Funktion $\mathcal{K}$ herleiten durch

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial \mathcal{K}(Q, P, t)}{\partial P_i}, \quad \dot{P}_i = - \frac{\partial \mathcal{K}(Q, P, t)}{\partial Q_i}, \tag{29.7}$$

wobei es zu jedem $\mathcal{H}$ ein $\mathcal{K}$ geben soll. Wir verlangen also Forminvarianz der Gleichungen.

Wir können solch eine Transformation auf folgende Art und Weise konstruieren: Unterscheiden sich $\sum_i p_i\dot{q}_i - \mathcal{H}$ und $\sum_i P_i\dot{Q}_i - \mathcal{K}$ nur durch ein vollständiges Differential $\mathrm{d}F_1(q,Q,t)/\mathrm{d}t$, so folgt aus dem Variationsprinzip für $\sum_i p_i\dot{q}_i - \mathcal{H}$ auch das für $\sum_i P_i\dot{Q}_i - \mathcal{K}$. Es gilt dann also

$$\sum_i p_i\dot{q}_i - \mathcal{H} = \sum_i P_i\dot{Q}_i - \mathcal{K} + \frac{\mathrm{d}F_1(q,Q,t)}{\mathrm{d}t} \tag{29.8}$$

oder nach Multiplikation mit $\mathrm{d}t$

$$\sum_i p_i\mathrm{d}q_i - \mathcal{H}\mathrm{d}t = \sum_i P_i\mathrm{d}Q_i - \mathcal{K}\mathrm{d}t + \sum_i \frac{\partial F_1}{\partial q_i}\mathrm{d}q_i + \sum_i \frac{\partial F_1}{\partial Q_i}\mathrm{d}Q_i + \frac{\partial F_1}{\partial t}\mathrm{d}t, \tag{29.9}$$

was mit

$$p_i = \frac{\partial F_1(q,Q,t)}{\partial q_i}, \quad P_i = -\frac{\partial F_1(q,Q,t)}{\partial Q_i}, \quad \mathcal{K} = \mathcal{H} + \frac{\partial F_1(q,Q,t)}{\partial t} \tag{29.10}$$

erfüllt ist.

Statt $\sum_i p_i\dot{q}_i - \mathcal{H}$ können wir auch $-\sum_i q_i\dot{p}_i - \mathcal{H}$ verwenden. Entsprechend können wir statt $\sum_i P_i\dot{Q}_i - \mathcal{K}$ auch $-\sum_i Q_i\dot{P}_i - \mathcal{K}$ verwenden. Damit erhalten wir drei weitere Möglichkeiten von Transformationen,

$$p_i = \frac{\partial F_2(q,P,t)}{\partial q_i}, \quad Q_i = \frac{\partial F_2(q,P,t)}{\partial P_i}, \quad \mathcal{K} = \mathcal{H} + \frac{\partial F_2(q,P,t)}{\partial t} \tag{29.11}$$

oder

$$q_i = -\frac{\partial F_3(p,Q,t)}{\partial p_i}, \quad P_i = -\frac{\partial F_3(p,Q,t)}{\partial Q_i}, \quad \mathcal{K} = \mathcal{H} + \frac{\partial F_3(p,Q,t)}{\partial t} \tag{29.12}$$

oder

$$q_i = -\frac{\partial F_4(p,P,t)}{\partial p_i}, \quad Q_i = \frac{\partial F_4(p,P,t)}{\partial P_I}, \quad \mathcal{K} = \mathcal{H} + \frac{\partial F_4(p,P,t)}{\partial t}. \tag{29.13}$$

Man kann auch für verschiedene Paare kanonischer Variabler unabhängig wählen zwischen $p_i\dot{q}_i$ und $-q_i\dot{p}_i$ und entsprechend zwischen $P_i\dot{Q}_i$ und $-Q_i\dot{P}_i$.

29.c Beispiele

α) Mit

$$F_1 = \sum_i q_iQ_i \tag{29.14}$$

erhält man

$$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i} = Q_i, \quad P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i} = -q_i. \tag{29.15}$$

Durch diese Transformation werden die 'Impuls'- und 'Lage'-Koordinaten ausgetauscht.
β) Wir wählen nun

$$F_2 = \sum_j P_j f_j(q_1, q_2, ..., q_n, t) \tag{29.16}$$

und erhalten

$$Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = f_i(q_1, q_2, ...q_n, t), \quad p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} = \sum_j P_j \frac{\partial f_j}{\partial q_i}. \tag{29.17}$$

Man bezeichnet eine solche Transformation als Punkttransformation, da die Lagekoordinaten Q nur Funktionen der Lagekoordinaten q sind.
γ) Speziell können wir dazu ein rotierendes Koordinatensystem betrachten. Wir setzen

$$F_2 = \sum_j P_{j\alpha} A_{\alpha\beta}(t) q_{j\beta} \tag{29.18}$$

mit einer orthogonalen zeitabhängigen Matrix A. Es folgt

$$Q_{i\alpha} = \frac{\partial F_2}{\partial P_{i\alpha}} = A_{\alpha\beta} q_{j\beta}, \quad p_{i\alpha} = \frac{\partial F_2}{\partial q_{i\alpha}} = A_{\beta\alpha} P_{i\beta} \tag{29.19}$$

Da A orthogonal sein soll, folgt $P_{i\gamma} = A_{\gamma\alpha} p_{i\alpha}$ und

$$\mathcal{K} = \mathcal{H} + \sum_j P_{j\alpha} \dot{A}_{\alpha\beta} q_{j\beta} = \mathcal{H} + \sum_j P_{j\alpha} \dot{A}_{\alpha\beta} A_{\gamma\beta} Q_{j\beta}. \tag{29.20}$$

Tatsächlich vermittelt $\dot{A}A^{\mathrm{T}}$ eine Rotation. Als Beispiel betrachten wir eine Rotation um die z-Achse,

$$A = \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi & 0 \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \dot{A} = \dot{\phi} \begin{pmatrix} -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ -\cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{29.21}$$

$$\dot{A}A^{\mathrm{T}} = \dot{\phi} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{29.22}$$

Mit $\dot{\phi} = \Omega$ erhalten wir

$$\mathcal{K} = \mathcal{H} + \Omega \sum_j (P_{jx} Q_{jy} - P_{jy} Q_{jx}) = \mathcal{H} - \Omega L_z. \tag{29.23}$$

Allgemein gilt

$$\mathcal{K} = \mathcal{H} - \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{L}. \tag{29.24}$$

Es sei etwa

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \mathcal{V}(|\mathbf{q}|). \tag{29.25}$$

Dann folgt

$$\mathcal{K} = \frac{P^2}{2m} + \mathcal{V}(|\mathbf{Q}|) - [\mathbf{\Omega}, \mathbf{Q}, \mathbf{P}] \tag{29.26}$$

und die Bewegungsgleichungen

$$\dot{\mathbf{Q}} = \operatorname{grad}_{\mathbf{P}} \mathcal{K} = \frac{\mathbf{P}}{m} - \mathbf{\Omega} \times \mathbf{Q}, \tag{29.27}$$

$$\dot{\mathbf{P}} = -\operatorname{grad}_{\mathbf{Q}} \mathcal{K} = -\operatorname{grad}_{\mathbf{Q}} \mathcal{V} - \mathbf{\Omega} \times \mathbf{P}. \tag{29.28}$$

Aufgabe Man stelle die Bewegungsgleichung für $\mathbf{Q}$ auf durch Elimination von $\mathbf{P}$ und $\dot{\mathbf{P}}$ und vergleiche mit (26.10).

29.d Invarianz der Poisson-Klammern

Wir hatten die Poisson-Klammern

$$\{p_i, p_j\} = 0, \quad \{q_i, q_j\} = 0, \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij}. \tag{29.29}$$

Was ergibt sich für die Q und P? Aus

$$p_i = \frac{\partial F_1(q, Q, t)}{\partial q_i}, \quad -P_i = \frac{\partial F_1(q, Q, t)}{\partial Q_i} \tag{29.30}$$

folgt für die zweiten Ableitungen

$$A_{ij} = \frac{\partial p_i}{\partial q_j} = \frac{\partial^2 F_1}{\partial q_i \partial q_j} = \frac{\partial p_j}{\partial q_i} = A_{ji}. \tag{29.31}$$

Schreiben wir allgemein

$$\begin{pmatrix} \mathrm{d}p \\ -\mathrm{d}P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{d}q \\ \mathrm{d}Q \end{pmatrix} \tag{29.32}$$

mit Spaltenvektoren $\mathrm{d}p$, $\mathrm{d}P$, $\mathrm{d}q$, $\mathrm{d}Q$ und Matrizen A, B, C und D, so erhalten wir die Symmetrie-Beziehungen

$$A^{\mathrm{T}} = A, \quad B^{\mathrm{T}} = C, \quad D^{\mathrm{T}} = D, \tag{29.33}$$

da die Matrix $\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$ symmetrisch ist. Lösen wir nun $\mathrm{d}p = A\mathrm{d}q + B\mathrm{d}Q$ nach $\mathrm{d}Q$ auf und berechnen auch $\mathrm{d}P$, so folgt

$$\mathrm{d}Q = B^{-1}\mathrm{d}p - B^{-1}A\mathrm{d}q, \tag{29.34}$$

$$\mathrm{d}P = -C\mathrm{d}q - D\mathrm{d}Q = (-C + DB^{-1}A)\mathrm{d}q - DB^{-1}\mathrm{d}p. \tag{29.35}$$

Dann folgt

$$\begin{aligned} \{Q_i, Q_j\} &= \sum_k \left(\frac{\partial Q_i}{\partial q_k} \frac{\partial Q_j}{\partial p_k} - \frac{\partial Q_i}{\partial p_k} \frac{\partial Q_j}{\partial q_k} \right) \\ &= \sum_k (-B^{-1}A)_{ik} (B^{-1})_{jk} - (B^{-1})_{ik} (-B^{-1}A)_{jk} \\ &= (-B^{-1}AB^{-1\,\mathrm{T}} + B^{-1}A^{\mathrm{T}}B^{-1\,\mathrm{T}})_{ij} = 0 \end{aligned} \tag{29.36}$$

wegen $A = A^{\mathrm{T}}$. Weiter erhalten wir

$$\begin{aligned}
\{Q_i, P_j\} &= \sum_k \left(\frac{\partial Q_i}{\partial q_k} \frac{\partial P_j}{\partial p_k} - \frac{\partial Q_i}{\partial p_k} \frac{\partial P_j}{\partial q_k} \right) && (29.37) \\
&= \sum_k \left((-B^{-1}A)_{ik}(-DB^{-1})_{jk} - (B^{-1}_{ik}(-C + DB^{-1}A)_{jk} \right) \\
&= (B^{-1}AB^{-1\,\mathrm{T}}D^{\mathrm{T}} + B^{-1}C^{\mathrm{T}} - B^{-1}A^{\mathrm{T}}B^{-1\,\mathrm{T}}D^{\mathrm{T}})_{ij} = \delta_{ij}
\end{aligned}$$

wegen $A = A^{\mathrm{T}}$ und $B = C^{\mathrm{T}}$. Ähnlich zeigt man

$$\{P_i, P_j\} = 0. \qquad (29.38)$$

Die neuen kanonischen Variablen P und Q erfüllen die gleichen Poisson-Klammern.

Man kann umgekehrt zeigen: Führt man eine Transformation $Q_i = Q_i(p, q, t)$, $P_i = P_i(p, q, t)$ ein, so dass die Poisson-Klammern (29.36,29.37,29.38) gelten, dann gibt es eine Funktion F_1, die diese Transformation erzeugt. Es sei nämlich

$$\begin{pmatrix} \mathrm{d}Q \\ \mathrm{d}P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E & F \\ G & H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{d}q \\ \mathrm{d}p \end{pmatrix}. \qquad (29.39)$$

Aus den Poisson-Klammern folgen die Bedingungen an die Matrizen E, F, G und H

$$\begin{aligned}
\{Q_i, Q_j\} &= \sum_k \left(\frac{\partial Q_i}{\partial q_k} \frac{\partial Q_j}{\partial p_k} - \frac{\partial Q_i}{\partial p_k} \frac{\partial Q_j}{\partial p_k} \right) = \sum_k (E_{ik}F_{jk} - F_{ik}E_{jk}) \\
&= (EF^{\mathrm{T}} - FE^{\mathrm{T}})_{ij} = 0 && (29.40) \\
\{Q_i, P_j\} &= (EH^{\mathrm{T}} - FG^{\mathrm{T}})_{ij} = \delta_{ij} && (29.41) \\
\{P_i, P_j\} &= (GH^{\mathrm{T}} - HG^{\mathrm{T}})_{ij} = 0. && (29.42)
\end{aligned}$$

Wir können nun $\mathrm{d}p$, $\mathrm{d}P$ nach $\mathrm{d}q$, $\mathrm{d}Q$ auflösen. Wir erhalten (29.32) mit

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -F^{-1}E & F^{-1} \\ HF^{-1}E - G & -HF^{-1} \end{pmatrix}. \qquad (29.43)$$

Aus der Gleichungen (29.40) findet man, dass $F^{-1}E$ symmetrisch ist. Daher ist $A^{\mathrm{T}} = A$. Multiplizieren wir Gl. (29.41) von links mit HF^{-1}, so folgt

$$HF^{-1}EH^{\mathrm{T}} - HG^{\mathrm{T}} = HF^{-1}. \qquad (29.44)$$

Da $F^{-1}E$ symmetrisch ist und auf grund von (29.42) auch HG^{T} symmetrisch ist, ist auch $D = D^{\mathrm{T}}$ symmetrisch. Multiplizieren wir schließlich $F^{-1}E$, das symmetrisch ist, von links mit H und verwenden $HE^{\mathrm{T}} = GF^{\mathrm{T}} + \mathbf{1}$ aus (29.42), so folgt

$$C = HF^{-1}E - G = HE^{\mathrm{T}}F^{-1\mathrm{T}} - G = GF^{\mathrm{T}}F^{-1\mathrm{T}} + F^{-1\mathrm{T}} - G = F^{-1\mathrm{T}} = B^{\mathrm{T}}. \qquad (29.45)$$

Daher gelten die drei Integrabilitäts-Bedingungen (29.33), sodass eine Funktion F_1 existiert.

29.e Anwendung: Anharmonischer Oszillator

Wir betrachten wieder den eindimensionalen harmonischen Oszillator mit der Hamilton-Funktion

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{f}{2}q^2 + \frac{g}{4}q^4. \tag{29.46}$$

Wir wollen die Hamilton-Funktion auf eine integrierbare Form bringen (in Ordnung g) und verwenden dafür die erzeugende Funktion

$$F_2 = Pq + g\gamma(P,q) + O(g^2). \tag{29.47}$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} p &= \frac{\partial F_2}{\partial q} = P + g\frac{\partial\gamma(P,q)}{\partial q} + O(g^2) = P + g\frac{\partial\gamma(P,Q)}{\partial Q} + O(g^2), && (29.48)\\ Q &= \frac{\partial F_2}{\partial P} = q + g\frac{\partial\gamma(P,q)}{\partial P} + O(g^2), && (29.49)\\ q &= Q - g\frac{\partial\gamma(P,Q)}{\partial P} + O(g^2). && (29.50) \end{aligned}$$

Die Ersetzung von q durch Q in den partiellen Ableitungen ist möglich, da der Unterschied um einen Faktor g kleiner ist, also erst in Ordnung g^2 beiträgt. Wir erhalten damit

$$\begin{aligned} \mathcal{K} &= \frac{1}{2m}\left(P + g\frac{\partial\gamma}{\partial Q}\right)^2 + \frac{f}{2}\left(Q - g\frac{\partial\gamma}{\partial P}\right)^2 + \frac{g}{4}Q^4 + O(g^2)\\ &= \frac{1}{2m}P^2 + \frac{f}{2}Q^2 + g\left(\frac{1}{m}P\frac{\partial\gamma}{\partial Q} - fQ\frac{\partial\gamma}{\partial P} + \frac{Q^4}{4}\right) + O(g^2). && (29.51) \end{aligned}$$

Wir wollen $\mathcal{K}$ auf die Form

$$\mathcal{K} = \mathcal{K}_0 + gc\mathcal{K}_0^2 + O(g^2), \quad \mathcal{K}_0 = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{f}{2}Q^2 \tag{29.52}$$

bringen. Dann ist $\mathcal{K}_0 = E_0$ Erhaltungsgröße. Dies ist möglich mit

$$\gamma = \alpha PQ^3 + \beta P^3 Q. \tag{29.53}$$

Dann ist

$$\begin{aligned} \mathcal{K} - \mathcal{K}_0 &= g\left(\frac{3\alpha}{m}P^2Q^2 + \frac{\beta}{m}P^4 - f\alpha Q^4 - 3f\beta P^2Q^2 + \frac{Q^4}{4}\right) + O(g^2)\\ &= g\left(\frac{c}{4m^2}P^4 + \frac{cf}{2m}P^2Q^2 + \frac{cf^2}{4}Q^4\right) + O(g^2) && (29.54) \end{aligned}$$

zu erfüllen. Das Gleichsetzen der Koeffizienten von P^4, P^2Q^2 und Q^4 ergibt drei lineare Gleichungen für α, β und c mit der Lösung

$$\alpha = \frac{5}{32f}, \quad \beta = \frac{3}{32f^2m}, \quad c = \frac{3}{8f^2}. \tag{29.55}$$

Damit haben wir $\mathcal{K}$ auf die Form (29.52) gebracht. Die Bewegungsgleichungen lauten dann

$$\dot{P} = -\frac{\partial \mathcal{K}}{\partial Q} = -fQ \cdot (1 + 2gc\mathcal{K}_0), \quad \dot{Q} = \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial P} = \frac{P}{m}(1 + 2gc\mathcal{K}_0) \tag{29.56}$$

mit der Lösung

$$P = \sqrt{2mE_0}\cos(\omega t + \phi), \quad Q = \sqrt{\frac{2E_0}{f}}\sin(\omega t + \phi), \quad \omega = \sqrt{\frac{f}{m}}(1 + 2gcE_0). \tag{29.57}$$

Dabei sind E_0 und ϕ Integrationskonstanten. Schließlich kann man q und p aus den Transformationsformeln (29.48) und (29.50) aus P und Q gewinnen.

29.f Invarianz des Phasenraumvolumens

Im nächsten Abschnitt führen wir das Phasenraum-Volumen $\mathrm{d}^{3N}q\mathrm{d}^{3N}p$ ein. Wir zeigen hier, dass kanonische Transformationen das Phasenraumvolumen erhalten. Ausgehend von (29.39) erhalten wir die Jacobi-Determinante

$$\frac{\partial(Q,P)}{\partial(q,p)} = \det\begin{pmatrix} E & F \\ G & H \end{pmatrix}. \tag{29.58}$$

Diese Determinante können wir folgendermaßen auswerten: Wir beobachten

$$\begin{pmatrix} \mathbb{1} & -FH^{-1} \\ 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} E & F \\ G & H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E - FH^{-1}G & 0 \\ G & H \end{pmatrix}. \tag{29.59}$$

Da die Determinante der ersten Matrix im Produkt gleich Eins ist, folgt aus dem Determinanten-Multiplikations-Satz, dass auch die rechte Seite gleich der Jacobi-Determinante ist. Die rechte Seite ergibt

$$\frac{\partial(Q,P)}{\partial(q,p)} = \det(E - FH^{-1}G)\det H = \det(EH^{\mathrm{T}} - FH^{-1}GH^{\mathrm{T}}). \tag{29.60}$$

Berücksichtigen wir nun $GH^{\mathrm{T}} = HG^{\mathrm{T}}$, (29.42) und $EH^{\mathrm{T}} = FG^{\mathrm{T}} + \mathbb{1}$, (29.41), so folgt $EH^{\mathrm{T}} - FH^{-1}GH^{\mathrm{T}} = \mathbb{1}$ und damit

$$\frac{\partial(Q,P)}{\partial(q,p)} = 1. \tag{29.61}$$

Das Phasenraum-Volumen ist invariant unter kanonischen Transformationen.

30 Liouville-Satz

30.a Phasenraum, zeitliche Evolution

Als Phasenraum bezeichnet man den von den p_k und q_k aufgespannten Raum. Für N Teilchen ist das ein $6N$-dimensionaler Raum ($3N$ $p_{i\alpha}$s und $3N$ $q_{i\alpha}$s). Ein mechanisches System wird durch einen Punkt im Phasenraum charakterisiert, der als Funktion der Zeit den Phasenraum durchläuft. Um ein ganzes Ensemble beschreiben zu können, führt man in der Statistischen Mechanik eine Wahrscheinlichkeitsverteilung $\rho(p,q,t)\mathrm{d}^{3N}p\mathrm{d}^{3N}q$ ein.

Für untereinander nichtwechselwirkende Teilchen führt man eine Beschreibung im 6-dimensionalen Γ-Raum (3 p_αs, 3 q_αs) durch. Man führt z.B. für Teilchen in einem Beschleuniger die Wahrscheinlichkeitsverteilung $\rho(\mathbf{p},\mathbf{q},t)\mathrm{d}^3p$ d^3q ein.

Wir kommen auf den allgemeinen Fall von N wechselwirkenden Teilchen zurück. Für eine Funktion $F_0(p,q)$ zur Zeit 0 erhält man die zeitliche Evolution

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F(p,q,t) = \{F(p,q,t),\mathcal{H}\}. \tag{30.1}$$

Dies lässt sich Aufintegrieren zu

$$F(p,q,t) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}F_n(p,q) \text{ mit } F_n = \{F_{n-1},\mathcal{H}\}, \tag{30.2}$$

wie man durch Einsetzen in die Bewegungsgleichung (30.1) zeigt

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F(p,q,t) = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{t^{n-1}}{(n-1)!}F_n = \sum_n^{\infty}\frac{t^n}{n!}F_{n+1} = \sum_n^{\infty}\frac{t^n}{n!}\{F_n,\mathcal{H}\} = \{F(p,q,t),\mathcal{H}\}. \tag{30.3}$$

Mit $F(p,q,0) = F_0(p,q)$ ist auch die Anfangsbedingung erfüllt.

Ausgehend von Anfangsbedingungen p_i^0, q_i^0 zur Zeit 0 kann man die

$$p_i(t) = p_i^0 - t\frac{\partial\mathcal{H}(p^0,q^0)}{\partial q_i^0} + O(t^2), \quad q_i(t) = q_i^0 + t\frac{\partial\mathcal{H}(p^0,q^0)}{\partial p_i^0} + O(t^2) \tag{30.4}$$

verfolgen. Wir wollen nun zeigen, dass die Transformation $(p_i^0,q_i^0) \to (p_i(t),q_i(t))$ eine kanonische Transformation ist. Hierzu zeigen wir wir, dass die Zeitentwicklung (30.1) einer Poisson-Klammer der Funktionen zur Zeit 0 mit der Poissonklammer der zeitentwickelten Funktionen übereinstimmt,

$$\{F_0,G_0\}(t) = \{F(t),G(t)\}. \tag{30.5}$$

Hierzu leiten wir $K(t) := \{F(t),G(t)\}$ nach der Zeit ab. Wir erhalten

$$\dot{K}(t) = \{\dot{F}(t),G(t)\} + \{F(t),\dot{G}(t)\} = \{\{F(t),\mathcal{H}\},G(t)\} + \{F(t),\{G(t),\mathcal{H}\}\}. \tag{30.6}$$

Man verwendet nun die Jacobi-Identität

$$\{A,\{B,C\}\}+\{B,\{C,A\}\}+\{C,\{A,B\}\}=0, \tag{30.7}$$

die man elementar verifizieren kann.[8] Damit erhält man aus (30.6)

$$\dot{K}(t)=\{K(t),\mathcal{H}\}. \tag{30.8}$$

$K(t)$ transformiert sich also genauso aus $K_0=\{F_0,G_0\}$ wie die Funktionen, die der Zeitentwicklung (30.1) unterworfen sind. Damit ist (30.5) gezeigt.

Damit finden wir, dass die Beziehungen für die Poissonklammern

$$\begin{aligned}
\{q_i(t),q_j(t)\} &= \{q_i^0,q_j^0\}(t)=0, && (30.9)\\
\{p_i(t),p_j(t)\} &= \{p_i^0,p_j^0\}(t)=0, && (30.10)\\
\{q_i(t),p_j(t)\} &= \{q_i^0,p_j^0\}(t)=\delta_{ij}. && (30.11)
\end{aligned}$$

gelten, da sich Konstante unter der Zeitentwicklung nicht verändern. Es sei noch bemerkt, dass die Transformation (30.2) in der Quantenmechanik $F(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathcal{H}t/\hbar}F_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathcal{H}t/\hbar}$ geschrieben wird und dort auch als unitäre Transformation bezeichnet wird.

30.b Phasenraumvolumen

Das Volumenelement des Phasenraumvolumens ist

$$\mathrm{d}\Omega=\mathrm{d}^{3N}p\,\mathrm{d}^{3N}q. \tag{30.12}$$

Wir zeigen nun, dass sich das Volumenelement als Funktion der Zeit nicht ändert, dass also das Phasenraumvolumen konstant ist. Verfolgt man also ein Gebiet des Phasenraums im Laufe der Zeit, so ändert sich sein Volumen nicht. Hierzu müssen wir die Jacobi-Determinante

$$\frac{\mathrm{d}\Omega(t)}{\mathrm{d}\Omega(t_0)}=\frac{\partial(p_i,q_i)}{\partial(p_i^0,q_i^0)} \tag{30.13}$$

[8] Die Jacobi-Identität kann man folgendermaßen zeigen: Wir fassen die p_i und q_i zu einem Satz Variablen u_i zusammen, etwa $q_i=u_i$, $p_i=u_{i+n}$. Dann können wir die Klammer

$$\{B,C\}=\sum_{ij}\sigma_{ij}\partial_i B\partial_j C$$

schreiben, wobei σ antisymmetrisch ist, $\sigma_{ji}=-\sigma_{ij}$. Dann folgt

$$\{A,\{B,C\}\}=\sum_{ijkl}\sigma_{ij}\sigma_{kl}\partial_k A\partial_l(\partial_i B\partial_j C)=\sum_{ijkl}\sigma_{ij}\sigma_{kl}(\partial_k A\partial_l\partial_i B\partial_j C+\partial_k A\partial_i B\partial_l\partial_j C).$$

Im zweiten Term der Summe permutiert man nun die Indices $i\to k\to j\to l\to i$ und erhält

$$\{A,\{B,C\}\}=\sum_{ijkl}\sigma_{ij}\sigma_{kl}(\partial_k A\partial_l\partial_i B\partial_j C-\partial_k B\partial_i\partial_l C\partial_j A).$$

Addiert man nun die beiden anderen Beiträge, die man durch zyklische Vertauschung von A, B und C erhält, hinzu, so heben sich alle Beiträge weg.

betrachten. Wir tun das für eine infinitesimale Zeitdifferenz $\tau = t - t_0$. Wir finden

$$p_i = p_i^0 - \tau \frac{\partial \mathcal{H}(p^0, q^0)}{\partial q_i^0} + O(\tau^2), \quad q_i = q_i^0 + \tau \frac{\partial \mathcal{H}(p^0, q^0)}{\partial p_i^0} + O(\tau^2) \tag{30.14}$$

Damit hat die Jacobi-Matrix die Form

$$\begin{pmatrix} \mathbb{1} + \tau A & \tau B \\ \tau C & \mathbb{1} + \tau D \end{pmatrix} + O(\tau^2) \tag{30.15}$$

mit Matrizen A, B, C und D

$$\frac{\partial p_i}{\partial p_j^0} = \delta_{ij} + \tau A_{ij}, \quad A_{ij} = -\frac{\partial^2 \mathcal{H}(p^0, q^0)}{\partial q_i^0 \partial p_j^0}, \quad \frac{\partial p_i}{\partial q_j^0} = \tau B_{ij}, \tag{30.16}$$

$$\frac{\partial q_i}{\partial p_j^0} = \tau C_{ij}, \quad \frac{\partial q_i}{\partial q_j^0} = \delta_{ij} + \tau D_{ij}, \quad D_{ij} = \frac{\partial^2 \mathcal{H}(p^0, q^0)}{\partial p_i^0 \partial q_j^0}. \tag{30.17}$$

Die Jacobi-Determinante ergibt sich in erster Ordnung in τ zu

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\Omega(t)}{\mathrm{d}\Omega(t_0)} &= 1 + \tau \mathrm{Sp}(A + D) + O(\tau^2) \\ &= 1 + \tau \sum_i \left(-\frac{\partial^2 \mathcal{H}(p^0, q^0)}{\partial q_i^0 \partial p_i^0} + \frac{\partial^2 \mathcal{H}(p^0, q^0)}{\partial p_i^0 \partial q_i^0}\right) + O(\tau^2) \\ &= 1 + O(\tau^2). \end{aligned} \tag{30.18}$$

Mit Sp haben wir die Spur der Matrizen bezeichnet. Dies ist die Summe der Diagonalmatrixelemente. Daraus folgt

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\mathrm{d}\Omega(t))|_{t=t_0} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}(\mathrm{d}\Omega(t_0 + \tau))|_{\tau=0} = 0. \tag{30.19}$$

Da dies für alle t_0 gilt, ist $\mathrm{d}\Omega(t)$ konstant. Das Phasenraumvolumen bleibt erhalten. Damit bleibt auch die Phasenraumdichte $\rho(p(t), q(t), t)$ erhalten, das heißt sie ist unabhängig von t. Man sagt auch, die substantielle Zeitableitung von ρ verschwindet. Substantiell heißt das ρ, das sich mit der Substanz (hier den Systemen im Ensemble) bewegt.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho = 0 = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial \rho}{\partial p_i}\dot{p}_i + \sum_i \frac{\partial \rho}{\partial q_i}\dot{q}_i = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \{\rho, \mathcal{H}\}, \tag{30.20}$$

woraus

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\{\rho, \mathcal{H}\}. \tag{30.21}$$

Dies ist die Liouville-Gleichung. Sie gibt an, wie sich die Phasenraumdichte an einem festen Punkt im Phasenraum verändert. Dies gilt für Systeme, deren Dynamik durch eine Hamilton-Funktion beschrieben werden kann. Sind Reibungskräfte (Dissipation) zu berücksichtigen, so gilt das nicht mehr.

F Kleine Schwingungen

31 Harmonische Näherung

31.a Lagrange-Funktion

Wir gehen aus von der Lagrange-Funktion $\mathcal{L} = \mathcal{T} - \mathcal{V}$ mit der potentiellen Energie $\mathcal{V}(q_1, q_2, ...q_N)$. Die verallgemeinerte Kraft Q_i ist

$$Q_i = -\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial q_j}. \tag{31.1}$$

Im statischen Gleichgewicht, das heißt in den Ruhelagen $q_1^0,\ q_2^0,\ ...\ \ q_n^0$ verschwindet Q_j,

$$Q_j = -\left.\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial q_j}\right|_{q_1^0,...q_n^0} = 0. \tag{31.2}$$

Wir entwickeln das Potential um die Ruhelage $q_j = q_j^0 + \eta_j$, wobei η_i die Auslenkung aus der Ruhelage darstellt, und erhalten

$$\mathcal{V} = \mathcal{V}(q_1^0, ...q_n^0) + \frac{1}{2}\sum_{ij} \eta_i \eta_j \mathcal{V}_{ij} + O(\eta^3), \tag{31.3}$$

$$\mathcal{V}_{ij} = \left.\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial q_i \partial q_j}\right|_{q_1^0,...q_n^0} = \mathcal{V}_{ji}. \tag{31.4}$$

Die Konstante $\mathcal{V}(q_1^0, ...q_n^0)$ trägt nicht zur Dynamik bei. Wir lassen sie im Folgenden weg. Wir vernachlässigen die Anharmonizitäten von Ordnung η^3. Wir benötigen noch die kinetische Energie. Falls die q_i kartesische Koordinaten sind, gilt

$$\mathcal{T} = \frac{1}{2}\sum_i m_i \dot{q}_i^2 = \frac{1}{2}\sum_i m_i \dot{\eta}_i^2 \tag{31.5}$$

und damit erhalten wir die Lagrange-Funktion in harmonischer Näherung

$$\mathcal{L}_{\rm harm} = \frac{1}{2}\sum_i m_i \dot{\eta}_i^2 - \frac{1}{2}\sum_{ij} \eta_i \eta_j \mathcal{V}_{ij}. \tag{31.6}$$

Falls die q_i nicht kartesische Koordinaten sind, dann können wir wie in (16.17) von der kinetischen Energie

$$\mathcal{T} = \frac{1}{2}\sum_{ij} \mathcal{T}_{ij}(q_1, ...q_n)\dot{q}_i \dot{q}_j \tag{31.7}$$

ausgehen und dies durch

$$\mathcal{T}_{\rm harm} = \frac{1}{2}\sum_{ij} m_{ij}\dot{\eta}_i \dot{\eta}_j, \quad m_{ij} = \mathcal{T}_{ij}(q_1^0, ...q_n^0) \tag{31.8}$$

mit den Massekoeffizienten $m_{ij} = m_{ji}$ ersetzen.

31.b Bewegungs-Gleichungen

Die Bewegungsgleichung $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\eta}_i} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\eta_i}$ ausgehend von (31.6) lautet

$$m_i\ddot{\eta}_i + \sum_j \mathcal{V}_{ij}\eta_j = 0. \tag{31.9}$$

Dies ist ein Satz gekoppelter Differentialgleichungen mit konstanten Koeffizienten. Hier verwendet man den Lösungsansatz

$$\eta_j = b_j \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}, \tag{31.10}$$

woraus man den Satz von Gleichungen

$$\underbrace{\left(-m_i b_i \omega^2 + \sum_j \mathcal{V}_{ij} b_j\right)} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} = 0 \tag{31.11}$$

erhält. Daher müssen die unterklammerten Ausdrücke gleich Null sein. Dies ist ein homogenes Gleichungskoeffizienten für die Amplituden b. Das System hat eine nicht-triviale Lösung, wenn die zugehörige Determinante verschwindet,

$$\det(\mathcal{V} - m\omega^2) = 0. \tag{31.12}$$

Dabei ist m eine Diagonalmatrix mit Elementen m_i in der Diagonalen. Damit ist das Problem auf ein Eigenwertproblem für ω^2 zurückgeführt. Man bezeichnet diese Gleichung wie auch die unten aufgeführte (31.15) als charakteristische Gleichung. Im allgemeinen gibt es n Lösungen ω_λ^2, $\lambda = 1, ...n$. Zu ω_λ ist auch $-\omega_\lambda$ 'Eigenfrequenz'. Falls die Massenpunkte verschiedene Massen haben, verwendet man zweckmäßig

$$\xi_i = \sqrt{m_i}\eta_i. \tag{31.13}$$

Es folgt

$$\ddot{\xi}_i + \sum_j \underbrace{\frac{\mathcal{V}}{\sqrt{m_i m_j}}}_{\Phi_{ij}} \xi_j = 0. \tag{31.14}$$

Dabei ist die dynamische Matrix Φ reell und symmetrisch.[9] Damit erhält man die charakteristische Gleichung

$$\det(\Phi - \omega^2 \mathbb{1}) = 0. \tag{31.15}$$

Da Φ reell und symmetrisch ist, kann es durch eine orthogonale Transformation diagonalisiert werden

$$\Phi = A\tilde{\omega}^2 A^{\mathrm{T}}, \quad AA^{\mathrm{T}} = A^{\mathrm{T}}A = \mathbb{1}. \tag{31.16}$$

[9] Falls $\mathcal{T} = \frac{1}{2}\sum_{ij} m_{ij}\dot{\eta}_i\dot{\eta}_j$, m symmetrisch, setzt man $\xi = \sqrt{m}\eta$, wobei ξ und η Spaltenvektoren und m eine Matrix ist. m ist positiv-definit, da die kinetische Energie stets positiv ist. Daher ist $\sqrt{m}$ reell und symmetrisch. Man erhält dann $\Phi = m^{-1/2}\mathcal{V}m^{-1/2}$, das ebenfalls reell und symmetrisch ist.

Dabei ist $\tilde{\omega}^2$ eine Diagonalmatrix mit Elementen ω_λ^2. Damit erhalten wir dann

$$\ddot{\xi} = -A\tilde{\omega}^2 A^{\mathrm{T}} \xi. \tag{31.17}$$

Multiplizieren wir die Gleichung mit A^{T} und führen wir

$$\zeta := A^{\mathrm{T}} \xi \tag{31.18}$$

ein, so folgt

$$\ddot{\zeta} = -\tilde{\omega}^2 \zeta \text{ oder } \ddot{\zeta}_\lambda = -\omega_\lambda^2 \zeta_\lambda. \tag{31.19}$$

Die ζ_λ bezeichnet man als Normalkoordinaten. Aus diesen erhält man dann durch Invertieren der Transformation (31.18)

$$\xi = A\zeta, \quad \xi_i(t) = \sum_\lambda A_{i\lambda} \zeta_\lambda(t). \tag{31.20}$$

Da Φ symmetrisch und reell ist, folgt dass die ω_λ^2 reell sind. Wir unterscheiden nun drei Fälle:

$$\omega_\lambda^2 > 0 \qquad \zeta_\lambda = \frac{1}{2}(c_\lambda \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\lambda t} + c_\lambda^* \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\lambda t} = \Re(c_\lambda \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\lambda t}) \tag{31.21}$$

$$\omega_\lambda^2 = 0 \qquad \zeta_\lambda = c_\lambda + \bar{c}_\lambda t \tag{31.22}$$

$$\omega_\lambda^2 < 0 \qquad \zeta_\lambda = c_\lambda \mathrm{e}^{\alpha_\lambda t} + \bar{c}_\lambda \mathrm{e}^{-\alpha_\lambda t}, \quad \alpha_\lambda = \sqrt{-\omega_\lambda^2}. \tag{31.23}$$

Der erste Fall beschreibt harmonische Schwingungen mit der Frequenz ω_λ. Der zweite eine lineare Bewegung; hier fehlt eine rücktreibende Kraft.[10] Im dritten Fall ist das System instabil. Die Bewegung kann exponentiell zunehmen.

Wir können noch kinetische Energie und potentielle Energie durch die Normalkoordinaten ausdrücken,

$$\mathcal{T} = \frac{1}{2}\sum_i m_i \dot{\eta}_i^2 = \frac{1}{2}\sum_i \dot{\xi}_i^2 = \frac{1}{2}\dot{\xi}^{\mathrm{T}}\dot{\xi} = \frac{1}{2}\dot{\zeta}^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} A \dot{\zeta} = \frac{1}{2}\dot{\zeta}^{\mathrm{T}}\dot{\zeta} \tag{31.24}$$

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2}\sum_{ij} \eta_i \mathcal{V}_{ij} \eta_j = \frac{1}{2}\eta^{\mathrm{T}} \mathcal{V} \eta = \frac{1}{2}\xi^{\mathrm{T}} \Phi \xi = \frac{1}{2}\xi^{\mathrm{T}} A \tilde{\omega}^2 A^{\mathrm{T}} \xi = \frac{1}{2}\zeta^{\mathrm{T}} \tilde{\omega}^2 \zeta \tag{31.25}$$

oder als Summen über die Normalkoordinaten ausgedrückt

$$\mathcal{T} = \frac{1}{2}\sum_\lambda \dot{\zeta}_\lambda^2, \quad \mathcal{V} = \frac{1}{2}\sum_\lambda \omega_\lambda^2 \zeta_\lambda^2. \tag{31.26}$$

[10] Dies gilt nur in linearer Näherung. In höherer Ordnung können rücktreibende oder abstoßende Kräfte auftreten. Ist dies nicht der Fall, so können sich bei Veränderung der Variablen die anderen Frequenzen ω ändern.

Äußere Kräfte Falls äußere Kräfte $F_i(t)$ angreifen, geht man folgendermaßen vor: Man multipliziert die Gleichung (falls man es mit verschiedenen Massen zu tun hat)

$$m_i \ddot{\eta}_i + \sum_j \mathcal{V}_{ij} \eta_j = F_i(t) \tag{31.27}$$

mit $1/\sqrt{m_i}$,

$$\ddot{\xi}_i + \sum_j \Phi_{ij} \xi_j = \frac{1}{\sqrt{m_i}} F_i(t), \quad \ddot{\xi} + \Phi \xi = \frac{1}{\sqrt{m}} F(t), \tag{31.28}$$

anschließend multiplizieren wir mit A^{T} und erhalten unter Verwendung von $A^{\mathrm{T}} \xi = \zeta$ und $A^{\mathrm{T}} \Phi \xi = A^{\mathrm{T}} A \tilde{\omega}^2 A^{\mathrm{T}} \xi = \tilde{\omega}^2 \zeta$

$$\ddot{\zeta} + \tilde{\omega}^2 \zeta = A^{\mathrm{T}} \frac{1}{\sqrt{m}} F(t) \tag{31.29}$$

oder

$$\ddot{\zeta}_\lambda + \omega_\lambda^2 \zeta_\lambda(t) = \sum_i A_{i\lambda} \frac{1}{\sqrt{m}_i} F_i(t). \tag{31.30}$$

Die Summe auf der rechten Seite ist die an der Normalkoordinate ζ_λ angreifende Kraft. Damit ist das Problem auf die Behandlung einzelner Oszillatoren reduziert und wir können zur Lösung die Überlegungen aus Abschnitt 9 anwenden.