Theoretische Physik I:

Vorlesung 15: Hamilton’sche Mechanik

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Hamilton’sche Mechanik ist eine andere Formulierung der klassischen Mechanik

- Während die Lagrangefunktion $L(q, \dot{q})$ eine Funktion von Koordinaten q_i und deren Geschwindigkeiten $\dot{q}$ ist, ist die Hamilton-Funktion $H(q, p)$ eine Funktion von Koordinaten q_i und deren kanonischen Impulse p_i.
- Man kann H von L und L von H ableiten, und zwar über ein Verfahren, das Legendre-Transformation genannt wird.
- Aus der Hamilton-Funktion kann man die Hamilton-Gleichungen ableiten, die die Zeitentwicklung, $\dot{q}$ und $\dot{p}$, bestimmen.

Der Hamilton-Formalismus ist ungefähr so kompliziert wie der Lagrange-Formalismus. Warum denn 2 Formalismen?

- Der Hamilton-Formalismus gibt ein besseres physikalisches Bild: Phasenraum.
- Der Hamilton-Formalismus wird in der Quantenmechanik benutzt.

Wir brauchen 3 Vorlesungen, um die Hamilton’sche Mechanik vollständig zu erforschen.

2: Wer hat recht?

Bevor wir den Hamilton-Formalismus einführen, müssen wir zuerst über partielle Ableitungen, Abhängigkeit, und was konstant bleibt diskutieren.
Hier ist ein Rätsel.
2 Studierende betrachten das gleiche System: Zentralkraft

$$L(r, \varphi) = \frac{m}{2}\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2\right) - V(r)$$

Student/in A leitet die Euler-Lagrange Gleichungen ab:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = \frac{\partial L}{\partial r} \quad \Rightarrow \quad m\ddot{r} = mr\dot{\varphi}^2 - V'(r)$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = \frac{\partial L}{\partial \varphi} \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\left(mr^2\dot{\varphi}\right) = 0$$

Man kann $mr^2\dot{\varphi} \equiv p_\varphi$ nennen:

$$m\ddot{r} = \frac{p_\varphi^2}{mr^3} - V'(r)\,.$$ **Das ist alles richtig. Gut!**

3: Eine falsche Alternative

Student/in B betrachtet die gleiche Lagrangefunktion:

$$L(r, \varphi) = \frac{m}{2}\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2\right) - V(r)$$

und leitet zuerst die φ-Euler-Lagrange Funktion ab:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = \frac{\partial L}{\partial \varphi} \quad \Rightarrow \frac{d}{dt}\left(mr^2\dot{\varphi}\right) = 0$$

Wir nennen $p_\varphi \equiv mr^2\dot{\varphi}$. Das schreiben wir in unsere Lagrangefunktion um:

$$L = \frac{m}{2}\dot{r}^2 + \frac{p_\varphi^2}{2mr^2} - V(r)$$ *Das ist richtig aber gefährlich!*

Als nächstes berechnet Student/in B die r Euler-Lagrange Gleichung:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = \frac{\partial L}{\partial r} \quad \Rightarrow \qquad m\ddot{r} = \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{p_\varphi^2}{2mr^2}\right) - V'(r)$$ *Stimmt, aber...*

$$m\ddot{r} = -\frac{p_\varphi^2}{mr^3} - V'(r)$$ **Falsch! Aber warum?**

4: Alternative, richtig gemacht

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Wir fangen wieder an mit:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot r} = \frac{\partial L}{\partial r} \quad \Rightarrow \quad m\ddot r = \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{p_\varphi^2}{2mr^2}\right) - V'(r)$$

Obwohl p_φ zeitunabhängig wird, $dp_\varphi/dt = 0$, ist p_φ *formell* eine Funktion von $\dot\varphi$ und r:

$$p_\varphi \equiv mr^2\dot\varphi\,.$$

Wenn ich $\frac{\partial}{\partial r}$ schreibe – muss ich sagen, was sich *nicht* ändert:

$$\begin{aligned}
m\ddot r &= \left.\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{p_\varphi^2}{2mr^2}\right)\right|_{\varphi,\dot r,\dot\varphi} - V' \\
&= \frac{p_\varphi^2}{2m}\frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{r^2} + \frac{1}{2mr^2}\left.\frac{\partial}{\partial r}p_\varphi^2\right|_{\varphi,\dot r,\dot\varphi} - V'
\end{aligned}$$

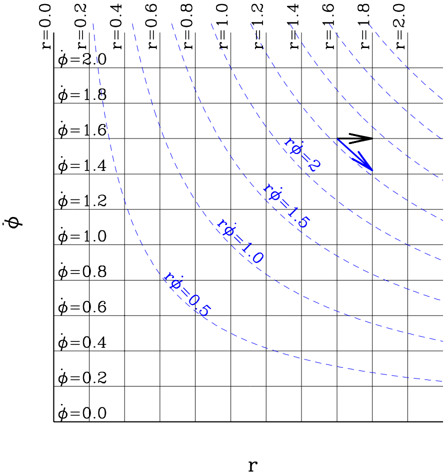
$$\text{aber :}\quad \left.\frac{\partial}{\partial r}p_\varphi\right|_{\varphi,\dot r,\dot\varphi} = \frac{\partial}{\partial r}mr^2\dot\varphi = 2mr\dot\varphi = 2\frac{p_\varphi}{r}$$

$$m\ddot r = -2\frac{p_\varphi^2}{2mr^3} + 4\frac{1}{2mr^2}\frac{p_\varphi^2}{r} - V'$$

$$m\ddot r = +\frac{p_\varphi^2}{mr^3} - V' \qquad \textbf{die richtige Antwort!}$$

5: Was bleibt fest?

Wenn ich eine Funktion mit mehreren Variablen habe, ist es wichtig, was fest bleibt, wenn ich eine Ableitung rechne:



Betrachten Sie eine Funktion $F(r, \dot\phi)$. Wenn wir $\partial F/\partial r$ rechnen, müssen wir sagen:
Bleibt $\dot\phi$ fest? (Schwarzer Pfeil)
Bleibt $r\dot\phi$ fest? (Blauer Pfeil)

Im Lagrange-Formalismus arbeiten wir immer mit $(q_i, \dot q_i)$ als unabhängig:

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = \left.\frac{\partial L}{\partial q_i}\right|_{q_{j\neq i},\dot q_j}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot q_i} = \left.\frac{\partial L}{\partial \dot q_i}\right|_{q_j,\dot q_{j\neq i}}$$

6: Hamilton-Funktion

In der Hamilton'sche Mechanik sind (q_i, p_i) die unabhängigen Variablen.
Betrachten Sie ein System: Koordinaten q_i, Lagrangefunktion $L(q_i, \dot{q}_i, t)$.
Die $\dot{q}_i$-Ableitungen der Lagrangefunktion sind die **kanonischen Impulse**

$$p_i \equiv \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} L(q_j, \dot{q}_j, t)\bigg|_{q_j, \dot{q}_{j \neq i}} . \qquad p_i = p_i(q_j, \dot{q}_j)$$

Die p_i sind (formelle) Funktionen von $(q_j, \dot{q}_j)$. Diese Beziehung ist invertierbar:

$$\dot{q}_j = \dot{q}_j(q_i, p_i) .$$

Wir haben die Hamilton-Funktion schon gesehen:

$$H(q_i, p_i, t) = \left(\sum_i p_i \dot{q}_i \right) - L(q_i, \dot{q}_i, t)$$

Weil $H(q_i, p_i)$ eine formelle Funktion von (q, p) ist, sollte man $\dot{q}_j = \dot{q}_j(q_i, p_i)$ schreiben, und H als Funktion von (q_i, p_i) erneut schreiben.

7: Hamilton'sche Gleichungen I

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Ich kann alle Zeitabhängigkeiten direkt von $H(q_i, p_i, t)$ ableiten!
das totale Differential der Hamilton-Funktion ist:

$$dH(q_i, p_i, t) = \sum_j \left(\frac{\partial H(q_i, p_i, t)}{\partial p_j} dp_j + \frac{\partial H(q_i, p_i, t)}{\partial q_j} dq_j \right) + \frac{\partial H(q_i, p_i, t)}{\partial t} dt$$

$$= d \left[\sum_j p_j \dot{q}_j - L(q_i, \dot{q}_i, t) \right]$$

$$= \sum_j \left[\dot{q}_j dp_j + p_j d\dot{q}_j - \frac{\partial L}{\partial q_j} dq_j - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} d\dot{q}_j \right] - \frac{\partial L}{\partial t} dt$$

Der Begriff von p_j ist $p_j = \partial L / \partial \dot{q}_j$. $p_j d\dot{q}_j$ und $-(\partial L / \partial \dot{q}_j) d\dot{q}_j$ heben sich auf.
Und $\partial L / \partial q_j = \dot{p}_j$ (Euler-Lagrange):

$$dH(q_i, p_i, t) = \frac{\partial H(q_i, p_i, t)}{\partial t} dt + \sum_j \frac{\partial H}{\partial p_j} dp_j + \frac{\partial H}{\partial q_j} dq_j = -\frac{\partial L(q_i, \dot{q}_i, t)}{\partial t} dt + \sum_j \dot{q}_j dp_j - \dot{p}_j dq_j$$

8: Hamilton'sche Gleichungen II

Totales Differential der Hamilton-Funktion:

$$dH(q_i, p_i, t) = \frac{\partial H(q_i, p_i, t)}{\partial t} dt + \sum_j \frac{\partial H}{\partial p_j} dp_j + \frac{\partial H}{\partial q_j} dq_j = -\frac{\partial L(q_i, \dot{q}_i, t)}{\partial t} dt + \sum_j \dot{q}_j dp_j - \dot{p}_j dq_j$$

Die dp_j, dq_j, und dt Änderungen sind jeweils unabhängig.
Deshalb lerne ich:

$$\frac{\partial H(q_i, p_i, t)}{\partial t} = -\frac{\partial L(q_i, p_i, t)}{\partial t} \tag{1}$$

$$\left.\frac{\partial H(q_i, p_i, t)}{\partial p_j}\right|_{q_i, p_{i \neq j}} = \dot{q}_j \tag{2}$$

$$\left.\frac{\partial H(q_i, p_i, t)}{\partial q_j}\right|_{q_{i \neq j}, p_j} = -\dot{p}_j \tag{3}$$

Wenn L eine explizite Zeitabhängigkeit aufweist, hat H die umgekehrte Zeitabhängigkeit.
Und Gl.(2) und Gl.(3) sind die **Hamilton'schen Gleichungen**

9: Beispiel: Teilchen mit $V(\vec{r})$

Als einfaches Beispiel betrachten wir ein Teilchen im 3-dimensionalen Raum, mit potenzieller Energie $V(x, y, z)$:

$$L(x, y, z, \dot{x}, \dot{y}, \dot{z}) = \frac{m}{2}\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2\right) - V(x, y, z)\,.$$

- Die kanonischen Impulse sind: $p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$, $p_y = m\dot{y}$, $p_z = m\dot{z}$ (oder $\vec{p} = m\vec{v}$)
- Deshalb sind: $\dot{x} = p_x/m$, $\dot{y} = p_y/m$, $\dot{z} = p_z/m$ (oder $\vec{v} = \vec{p}/m$)
- die Hamilton-Funktion ist

$$\begin{aligned} H(x, y, z, p_x, p_y, p_z) &= p_x\dot{x} + p_y\dot{y} + p_z\dot{z} - \frac{m}{2}\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2\right) + V(x, y, z) \\ &= \frac{p_x^2}{m} + \frac{p_y^2}{m} + \frac{p_z^2}{m} - \frac{p_x^2}{2m} - \frac{p_y^2}{2m} - \frac{p_z^2}{2m} + V(x, y, z) \\ &= \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z) \end{aligned}$$

10: Beispiel II

Von der letzten Folie:

- die Hamilton-Funktion ist

$$H(x, y, z, p_x, p_y, p_z) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z)$$

- Die Hamilton'sche Gleichungen sind:

$$\frac{\partial H}{\partial p_x} = \dot{x} \quad \Rightarrow \quad \frac{p_x}{m} = \dot{x} \quad \text{(schon gewusst)}$$

$$\frac{\partial H}{\partial x} = -\dot{p}_x \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial V}{\partial x} = -\dot{p}_x \quad \textbf{(Newton II)}$$

Die Hamilton'sche Gleichungen sind ein Begriff für $\vec{p}$ und die erwartete Bewegungsgleichungen (Newton II).

Nicht-triviales Beispiel: Zentralkraft in Kugelkoordinaten

$$L(r,\theta,\varphi,\dot r,\dot\theta,\dot\varphi) = \frac{m}{2}\left(\dot r^2 + r^2\dot\theta^2 + r^2\sin^2(\theta)\,\dot\varphi^2\right) - V(r)$$

Kanonische Impulse wie vorher rechnen:

$$p_r = m\dot r\,,\quad p_\theta = mr^2\dot\theta\,,\quad p_\varphi = mr^2\sin^2(\theta)\,\dot\varphi\,.$$

Hamilton-Funktion:

$$\begin{aligned} H &= p_r\dot r + p_\theta\dot\theta + p_\varphi\dot\varphi - \frac{m}{2}\left(\dot r^2 + r^2\dot\theta^2 + r^2\sin^2(\theta)\,\dot\varphi^2\right) + V(r) \\ &= \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} + \frac{p_\varphi^2}{2mr^2\sin^2(\theta)} + V(r) \end{aligned}$$

Die Koeffizienten $m/2$, $mr^2/2$, $mr^2\sin^2(\theta)/2$ sind jetzt $1/2m$, $1/2mr^2$, $1/2mr^2\sin^2(\theta)$.

12: Zentralkraft II

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} + \frac{p_\varphi^2}{2mr^2\sin^2(\theta)} + V(r)$$

Bewegungsgleichungen (Hamilton'sche Gleichungen)

$$\dot{r} = \frac{\partial H}{\partial p_r} = \frac{p_r}{m} \qquad \dot{p}_r = -\frac{\partial H}{\partial r} = \frac{p_\theta^2}{mr^3} + \frac{p_\varphi^2}{mr^3\sin^2(\theta)} - V'(r)$$

$$\dot{\theta} = \frac{\partial H}{\partial p_\theta} = \frac{p_\theta}{mr^2} \qquad \dot{p}_\theta = -\frac{\partial H}{\partial \theta} = -\frac{p_\varphi^2\cos(\theta)}{mr^2\sin^3(\theta)}$$

$$\dot{\varphi} = \frac{\partial H}{\partial p_\varphi} = \frac{p_\varphi}{mr^2\sin^2(\theta)} \qquad \dot{p}_\varphi = -\frac{\partial H}{\partial \varphi} = 0$$

Die Gleichungen für $\dot{r}, \dot{\theta}, \dot{\varphi}$ kennen wir schon – sie sind die Ausdrücke, die wir für p_r, p_θ, p_φ gefunden haben.
Aber wenn man direkt mit $H(q, p)$ anfängt, müssen wir die ableiten.
Die anderen 3 Gleichungen sind identisch zu den Euler-Lagrange Gleichungen, wenn wir die linken Gleichungen benutzen, um die p_i als Funktionen von $\dot{q}_i$ umzuschreiben.

13: Und wenn ich mit H anfange?

Jemand gibt mir eine Hamilton-Funktion $H(q_i, p_i)$.
Ich kann direkt die Hamilton'sche Gleichungen rechnen.
Aber können wir $L(q_i, \dot{q}_i)$ auch finden? *Yes We Can!*

- Die generalisierten Geschwindigkeiten durch $\dot{q}_i = \partial H / \partial p_i$ rechnen
- Davon $p_i(q_j, \dot{q}_j)$ rechnen
- Die Lagrangefunktion durch Legendre-Transformation finden

$$L(q, \dot{q}, t) = \sum_j p_j \dot{q}_j - H(q_i, p_i, t)$$

wobei ich die p_j (explizit und in H) in $\dot{q}_j$ umschreiben muss.

Die Legendre-Transformation geht in beide Richtungen.

14: Warum? Was lerne ich?

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Ist der Hamilton-Formalismus “besser?”

Ja und nein.

- Die Hamilton- und Lagrange-Formalismen sind äquivalent.
- Die Euler-Lagrange Gleichungen zu rechnen ist ungefähr so einfach/hart wie die Hamilton-Gleichungen zu rechnen.
- Es braucht extra Arbeit, von $L(q, \dot{q})$ zu $H(q, p)$ abzuleiten

ABER

- Wir brauchen $H(q, p)$ für Quantenmechanik
- Wir brauchen $H(q, p)$ für (quanten und klassische) statistische Physik
- (q, p) – Phasenraum – hat schöne Eigenschaften (Liouville Theorem)
- Die Transformationen innerhalb (q, p) sind breiter als innerhalb $(q, \dot{q})$ (kanonische Transformationen)
- Hamilton-Gleichungen sind 1. Ordnung – besser für numerische Rechnungen.

Diese Themen werden wir nächste Woche weiter diskutieren.

English summary

One must be careful, when taking partial derivatives, about what is held constant. We write $L(q, \dot{q})$ precisely because, in the Euler-Lagrange equations, one must take derivatives holding the other $q, \dot{q}$ fixed.

One can also derive all dynamics from the Hamiltonian:

$$H(q, p) = \sum_i p_i \dot{q}_i - L(q, \dot{q}) \qquad \textbf{Legendre transform}$$

$$\left.\frac{\partial H(q, p)}{\partial p_i}\right|_{q_j, p_{j \neq i}} = \dot{q}_i \,, \qquad \left.\frac{\partial H(q, p)}{\partial q_i}\right|_{q_{j \neq i}, p_j} = -\dot{p}_i \,.$$

Here it is important to solve for $\dot{q}_i$ in terms of the (q_j, p_j) and write H strictly in terms of (q, p), to avoid making a mistake when differentiating.
The first **Hamilton's equation** is equivalent to the defintion of p_i. The second is equivalent to the Euler-Lagrange equation.

One can also start with H and derive L through the same **Legendre transform** which leads from L to H.