Theoretische Physik I:

Vorlesung 17: Hamilton III

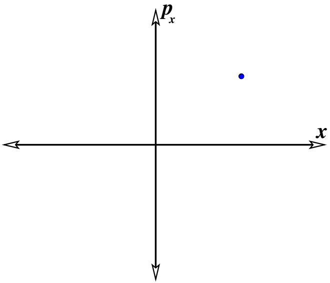
TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Wir diskutieren zwei weitere Themen:

- Phasenraum: wo Zustände $(q_i(t), p_i(t))$ “leben”.
  Wichtige Eigenschaften: Einheiten, Phasenvolumen.
- Kanonische Transformationen: weitere Umschreibungen des Hamilton’schen Systems.

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Betrachten Sie ein System mit N Koordinaten q_i.
Als wir numerische Methoden diskutiert haben, haben wir es praktisch gefunden, den $2N$-dimensionalen Raum $(q_1, \ldots, q_N, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_N)$ zu betrachten.

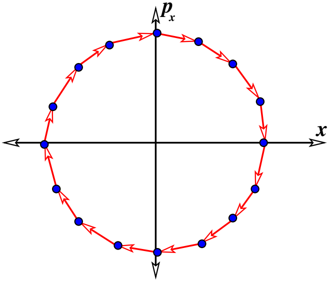


In der Hamilton'sche Mechanik haben wir stattdessen den **Phasenraum** $(q_1, \ldots, q_N, p_1, \ldots, p_N)$. Das hat eine Dimension und eine Achse für jede Koordinate q_i und jeden kanonischen Impuls p_i.
Der Harmonische Oszillator: (x, p_x)

Anfangsdaten $(x(t_0), p_x(t_0))$ sind ein Punkt in Phasenraum.

3: Zeitentwicklung in Phasenraum

Zeitentwicklung ist Bewegung durch den Phasenraum.
Die Zeitgeschichte eines Systems ist eine Bahn durch den Phasenraum.



Der harmonische Oszillator,

$$H(x, p_x) = \frac{D}{2}x^2 + \frac{1}{2m}p_x^2$$

hat als Zeitentwicklung

$$\text{Vertikal: } \dot{p}_x = -\frac{\partial H}{\partial x} = -Dx$$

$$\text{Horizont: } \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p_x} = +p_x/m$$

Die Zeitentwicklungbahn ist eine Ellipse.

Im Allgemeinen kann die Zeitentwicklungsbahn eine offene Kurve durch den Phasenraum sein.

4: Einheiten und Phasenraum

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Betrachten Sie die *Einheiten* der Koordinaten q_i und entweder $\dot{q}_i$ oder p_i.

Die Einheiten der Koordinaten q_i müssen nicht alle gleich sein.
Zum Beispiel, Kugelkoordinaten sind (r, θ, φ):

- r ist in Meter. Zeit ist in Sekunden. Deshalb ist $\dot{r} = dr/dt$ in m/s.
- θ, φ sind einheitslos. Deshalb ist $\dot{\theta}$ in 1/s (Hertz).

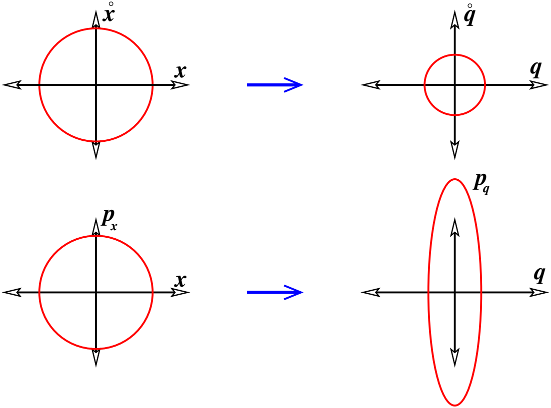
Aber $p_i = \partial L / \partial \dot{q}_i$. Deshalb hat p_i die gleichen Einheiten wie L (Energie), *über* den Einheiten der $\dot{q}_i$.

- $\dot{r}$ ist in m/s. Deshalb ist p_r in $(\text{kg m}^2/\text{s}^2)/(\text{m/s}) = \text{kg m/s}$ (wie üblich).
- Aber $p_\varphi = mr^2 \sin^2(\theta)\,\dot{\varphi}$ hat die Einheiten $(\text{kg m}^2/\text{s}^2)/(1/\text{s}) = \text{kg m}^2/\text{s}$.

Das Produkt $q_i p_i$ (keine Summe über i) hat immer die gleichen Einheiten:
$\text{kg m}^2/\text{s} = \text{J s}$, die gleichen Einheiten wie Wirkung – oder $\hbar$.

5: Phasenraum Volumen

Betrachten Sie eine Koordinatenänderung: $q = x/2$.
Wie schon gesehen ist $\dot{q} = \dot{x}/2$, aber $p_q = 2p_x$:



$(x, \dot{x}) \rightarrow (q, \dot{q})$: beide Achsen nehmen ab.

$(x, p_x) \rightarrow (q, p_q)$: wenn eine abnimmt, nimmt die andere zu.

Bei $(x, p_x) \rightarrow (q, p_q)$ “bleibt die Fläche gleich.”
Können wir das genauer sagen?

6: Integration über Phasenraum

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Normalerweise kann ich (q, p) nicht genau messen.
Dann habe ich eine *Wahrscheinlichkeitsdichte* $P(q, p)$.
Die Wahrscheinlichkeit, dass $q \in [q_1, q_2]$ und $p \in [p_1, p_2]$ ist

$$\int_{q_1}^{q_2} dq \int_{p_1}^{p_2} dp\ P(q, p)$$

oder im N-dimensionalen Raum:

$$\text{Wahrscheinlichkeit, in Region } R \text{ zu sein:} \qquad \int_R d^N q_i\ d^N p_i\ P(q_i, p_i)$$

Unter Koordinatentransformationen kann das Integrationsmaß sich ändern:

$$Q_i = Q_i(q_j) : \qquad \int d^N q_i d^N p_i = \int d^N Q_i d^N P_i \ \mathrm{Det}\, \frac{\partial q_i}{\partial Q_j}\ \mathrm{Det}\, \frac{\partial p_i}{\partial P_j}\ .$$

Hier ist $\mathrm{Det}\, \partial q_i / \partial Q_j$ die Jacobi-Determinante ...

Errinern Sie sich: bei neue Koordinaten $Q_i = Q_i(q_j)$ ändert sich die Integrationsmaß um eine Jacobi-Determinante:

$$\text{1 Koordinat:} \qquad \int f(q)dq = \int f(q(Q))\frac{dq(Q)}{dQ}dQ$$

und für mehrere Koordinaten:

$$\int f(q_1, q_2, ...)\ dq_1\ dq_2 ... = \int f(q_1(Q_i), q_2(Q_i), ...)\ \text{Det} \begin{vmatrix} \frac{\partial q_1}{\partial Q_1} & \frac{\partial q_1}{\partial Q_2} & ... \\ \frac{\partial q_2}{\partial Q_1} & \frac{\partial q_2}{\partial Q_2} & ... \\ ... & ... & ... \end{vmatrix} dQ_1\ dQ_2\ ...$$

eine Zeile für jeder q_i-Koordinate und eine Spalte für jeder Q_i-Koordinate. Dieses Determinante heißt die Jacobi-Determinante.

8: Jacobi-Determinante als verallgemeinernde Kreutzprodukt

9: Zurück zum Phasenraum

Betrachten wir wieder eine Koordinatentransformation:

$$Q_i = Q_i(q_j) : \qquad \int d^N q_i d^N p_i = \int d^N Q_i d^N P_i \;\mathrm{Det}\, \frac{\partial q_i}{\partial Q_j} \;\mathrm{Det}\, \frac{\partial p_i}{\partial P_j} \,.$$

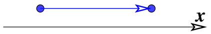
Hier sind die Determinanten die Jacobi-Determinanten der Koordinatentransformation. Aber

$$P_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_i} = \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial \dot{Q}_i} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} = \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial \dot{Q}_i} p_j = \sum_j \frac{\partial q_j}{\partial Q_i} p_j \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial P_i}{\partial p_j} = \frac{\partial q_j}{\partial Q_i} \,.$$

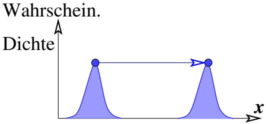
und deshalb ist Det $\frac{\partial q_i}{\partial Q_j} = 1 / \mathrm{Det}\, \frac{\partial p_i}{\partial P_j}$. Phasenvolumen ist koordinatenunabhängig:

$$\int d^N q_i d^N p_i = \int d^N Q_i d^N P_i \,, \qquad P(q_i, p_i) = P'(Q_i(q_j), P_i(p_j, q_j)).$$

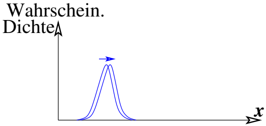
10: Zeitentwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte?



Betrachten Sie ein Teilchen.
Es bewegt sich in der $+x$-Richtung, mit Geschwindigkeit $v = dx/dt$.



Aber ich kenne $x(t = 0)$ nicht genau.
Ich habe nur eine Wahrscheinlichkeitsdichte $P(x, t)$.
Nach Zeit Δt bewegt sich das Teilchen $\Delta x = v\Delta t$.
Deshalb muss $P(x + \Delta x, t + \Delta t) = P(x, t)$.
Wie ändert sich P für kleine Δt?



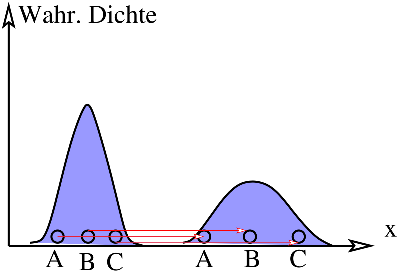
$$0 = \cancelto{v\Delta t}{\Delta x} \left.\frac{\partial P(x,t)}{\partial x}\right|_t + \Delta t \left.\frac{\partial P(x,t)}{\partial t}\right|_x$$

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial P(x,t)}{\partial x} v = -\frac{\partial P(x,t)}{\partial x}\frac{dx}{dt}\,.$$

11: Ändert sich Wahrscheinlichkeitsdichte?

TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

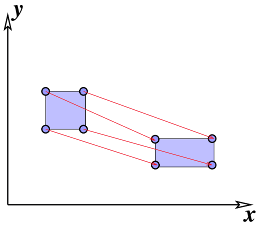
Und wenn dx/dt x-abhängig ist?



Der Bereich der x-Werte wird größer. Damit die Gesamtwahrscheinlichkeit 1 bleibt, muss die Wahrscheinlichkeitsdichte daher kleiner werden.

In diesem Fall: $$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} \neq -\frac{\partial P(x,t)}{\partial x}\frac{dx}{dt}.$$

In mehreren Dimensionen ist die Frage nicht mehr, ob dx/dt x-abhängig ist.
Die Frage ist: ändert sich die mögliche Fläche (Phasenraumvolumen)?



12: Zeitentwicklung: Satz von Liouville

Wenn ich $(q_i(t_0), p_i(t_0))$ *kenne*, kenne ich die Zeitentwicklung:

$$\dot{q}_i(t) = \frac{\partial H}{\partial p_i}\,, \qquad \dot{p}_i(t) = -\frac{\partial H}{\partial q_i}\,.$$

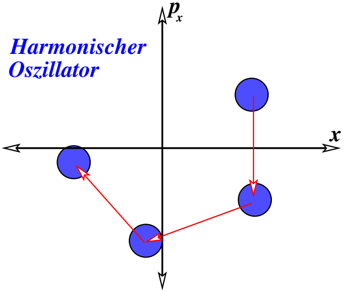
Und wenn ich nur die Anfangsbedingungen *ungefähr* kenne?

Satz von Liouville:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}P(q_i, p_i, t) &= -\sum_j \frac{\partial P(q_i, p_i, t)}{\partial q_j}\frac{\partial H}{\partial p_j} + \frac{\partial P(q_i, p_i, t)}{\partial p_j}\frac{\partial H}{\partial q_j} \\ &= -\Big[P(q, p)\,,\; H\Big] \\ &= -\sum_j \left(\dot{q}_j \frac{\partial P(q, p, t)}{\partial q_j} + \dot{p}_j \frac{\partial P(q, p, t)}{\partial p_j}\right)\,.\end{aligned}$$

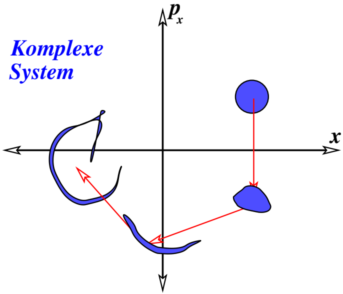
Bedeutung: $P(q, p, t)$ ändert sich durch zeit nur, weil p, q sich ändern.
Phasenvolumen ändert sich *nicht* durch Zeit.

13: Satz von Liouville in Bilder



Wenn ich in einem Bereich anfange, muss ich die Zeitentwicklung der Punkte in dem Bereich folgen. Der Bereich entwickelt sich mit der Zeit. Die Fläche bleibt gleich.

Für kompliziertere Systeme kann der erlaubte Bereich sich verdrehen, aber die Fläche bleibt gleich.



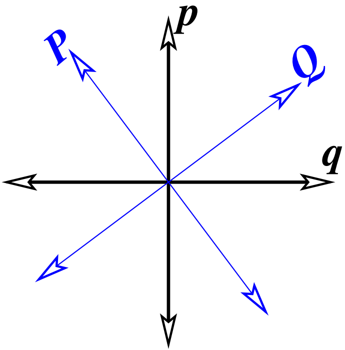
14: Phasenraum: Kommentare

TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

- Es wird wichtig sein in *statistischer Physik*, dass Phasenraumvolumen konserviert ist.
- In Quantentheorie kann ein System nicht ein einzelner Punkt im Phasenraum sein. Ungefähr darf es ein Phasenraumvolumen von $dqdp \geq \hbar$ ausfüllen. Um das genauer zu erklären, müssen wir auf Theorie II warten.

Jetzt lassen wir den Phasenraum hinter uns, und diskutieren noch ein weiteres Thema.

15: Nächste Thema: Kanonische Transformationen



Darf ich (p, q) rotieren?
Punkttransformationen mischen verschiedene q-Werte, und sie mischen verschiedene p-Werte. Aber sie mischen q nicht mit p.
Aber die Rolle, die q und p in $H(q, p)$ spielen, ist mehr symmetrisch.

Können solche Transformationen wichtig sein?

Nicht alle möglichen invertierbaren Transformationen

$$Q_i = Q_i(q, p)\,, \qquad P_i = P_i(q, p)$$

sind "erlaubt." Aber mehr als nur die Punkttransformationen $Q_i = Q_i(q)$!

16: Was macht eine Transformation kanonisch?

So dass eine Transformation “erlaubt” ist, brauchen wir Folgendes:

1. Die Transformation $Q_i = Q_i(q, p, t)$, $P_i = P_i(q, p, t)$ ist invertierbar;
2. Es gibt eine neue “Hamilton-Funktion” $K(Q, P, t)$, wobei

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H(q,p,t)}{\partial p_i} \quad \Rightarrow \quad \dot{Q}_i = \frac{\partial K(Q,P,t)}{\partial P_i}$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H(q,p,t)}{\partial q_i} \quad \Rightarrow \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial K(Q,P,t)}{\partial Q_i}$$

die gleiche Dynamik enthält.

Alle Transformationen, die diesen beiden Bedingungen gehorchen, sind kanonische Transformationen.
Solche Transformationen, wie Koordinatentransformationen, sind *Umschreibungen* unseres Systems, mit der gleichen Dynamik.

17: Kondition für Kanonische Transformationen

Hamilton'sche Prinzip: $\delta \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt = 0 = \delta \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_i p_i \dot{q}_i - H(q, p, t) \right) dt$

Eine Transformation $Q = Q(q, p, t)$, $P = P(q, p, t)$ ist nur dann **kanonisch**, wenn es eine Funktion $K(Q, P, t)$ gibt, die folgende Bedingungen erfüllt:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_i P_i \dot{Q}_i - K(Q, P, t) \right) dt = 0 \quad \text{für} \quad Q_i = Q_i(q(t), p(t), t)\,, \quad P_i = P_i(q(t), p(t), t)$$

Wenn wir die Lösungen, von $H(q, p)$, in unsere Transformation einschreiben, finden wir, dass sie auch eine Lösung für Hamilton'sche Dynamik mit $K(Q, P, t)$ sind.

18: Kanonische Transformationen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Unsere Kondition ist automatisch genau dann, wenn

$$\sum_i p_i \dot{q}_i - H(q,p,t) = c\left[\sum_i P_i \dot{Q}_i - K(Q,P,t)\right] + \frac{d}{dt}F(q,p,Q,P,t)\,,$$

wobei $\frac{d}{dt}F(q,p,Q,P,t)$ eine totale Ableitung ist.
Das ist so, weil

$$\delta \int \frac{dF(q,p,Q,P,t)}{dt}dt = \delta\left(F(q(t_2),p(t_2),...) - F(q(t_1),p(t_1),...)\right)$$

aber $\delta q, \delta p$ verschwinden zu den Zeiten t_1 und t_2 und sind nur nicht trivial für $t_1 < t < t_2$.

Die Möglichkeit $c \neq 1$ ist langweilig – ich könnte $Q_i \to c^{-1}Q_i$ und $K \to c^{-1}K$ umschreiben, und $c \to 1$.
Die interessante Fälle, die *Kanonischen Transformationen*, sind die mit $c = 1$.

19: Die standarde Möglichkeiten

Wir haben $F(q, Q, p, P, t)$. Aber es braucht nur halb so viele Variablen, weil sie nicht alle unabhängig sind. Die vier Standardmöglichkeiten sind:

1. $F = F_1(q, Q, t)$: q, Q sind unabhängig.
2. $F = F_2(q, P, t)$: q, P sind unabhängig.
3. $F = F_3(p, Q, t)$: p, Q sind unabhängig.
4. $F = F_4(p, P, t)$: p, P sind unabhängig.

(Die Möglichkeiten, wobei es nur (q, p) oder (Q, P) Abhängigkeit gibt, sind langweilig.)
Wir werden F_1, F_2 weiter diskutieren; die anderen sind ähnlich.

20: $F_1(q, Q, t)$

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Wir haben: $$\frac{dF_1(q,Q,t)}{dt} = \sum_i \left[\dot{q}_i \frac{\partial F}{\partial q_i} + \dot{Q}_i \frac{\partial F}{\partial Q_i}\right] + \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

$$\sum_i p_i \dot{q}_i - H(q,p,t) = \sum_i P_i \dot{Q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i}\dot{Q}_i - K(Q,P,t) + \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

Weil (q, Q) alle unabhängig sind, sind $\dot{q}, \dot{Q}$ auch alle unabhängig. Deshalb müssen die Koeffizienten von $\dot{q}$ und von $\dot{Q}$ verschwinden:

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

$$K(Q,P,t) = H(q(Q,P,t), p(Q,P,t), t) + \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

Als Beispiel, betrachten wir $F_1(q, Q) = -Q/q$:

$$p = \frac{\partial F_1}{\partial q} = \frac{Q}{q^2} \quad \Rightarrow \qquad Q = pq^2$$

$$P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} = +\frac{1}{q} \quad \Rightarrow \qquad P = \frac{1}{q}$$

21: F_2

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Wir schreiben: $F_2(q, P, t) = \hat{F}_2(q, P, t) - \sum_i P_i Q_i$

$$\sum_i p_i \dot{q}_i - H(q, p, t) = \cancel{\sum_i P_i \dot{Q}_i} - K(Q, P, t) + \dot{q}_i \frac{\partial \hat{F}_2}{\partial q_i} + \dot{P}_i \frac{\partial \hat{F}_2}{\partial P_i} - \sum_i \dot{P}_i Q_i - \cancel{\sum_i P_i \dot{Q}_i}$$

Diesmal sind q, P unabhängig: die Koeffizienten auf $\dot{q}$, $\dot{P}$ müssen verschwinden:

$$p_i = \frac{\partial \hat{F}_2}{\partial q_i}, \qquad Q_i = \frac{\partial \hat{F}_2}{\partial P_i}$$

$$K(Q, P, t) = H(q(Q, P, t), p(Q, P, t), t) + \frac{\partial \hat{F}_2}{\partial t}.$$

22: Triviales Beispiel

TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

Betrachten Sie $F_1(q, Q) = \sum_i q_i Q_i$. Wir finden:

$$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i} = Q_i \qquad\qquad Q_i = p_i$$

$$P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i} = -q_i \qquad\qquad P_i = -q_i$$

(p, q) ausgetauscht, mit $-$ Zeichen.
Das ist eine 90° Rotation im Phasenraum!

23: Nicht-triviales Beispiel

Betrachten Sie den harmonischen Oszillator:

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}q^2 \qquad (\omega^2 = D/m)$$

Probieren wir: $F_1(q,Q,t) = \frac{m\omega}{2}q^2\cot(Q)$

$$p = \frac{\partial F_1}{\partial q} = m\omega q\cot(Q) \qquad\qquad P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} = \frac{m\omega q^2}{2\sin^2(Q)}$$

$$q = \sqrt{\frac{2P}{m\omega}}\sin(Q) \qquad\qquad p = \sqrt{2m\omega P}\cos(Q)$$

$$K(Q,P) = H(q,p) + \cancelto{0}{\frac{\partial F}{\partial t}} = \frac{2m\omega P\cos^2(Q)}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\frac{2P}{m\omega}\sin^2(Q) = \omega P$$

Q ist zyklisch, P ist konserviert!

$$\dot{Q} = \frac{\partial K}{\partial P} = \omega \quad\Rightarrow\quad Q = Q_0 + \omega t$$

$$q = \sqrt{\frac{2P}{m\omega}}\sin(\omega t + Q_0) \qquad p = \sqrt{2m\omega P}\cos(\omega t + Q_0)$$

System gelöst!

24: English summary

The $2N$-dimensional space $(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$ is called **phase space.**
Contrary to $(q, \dot{q})$-space, the integration measure of phase space is preserved under coordinate transformations.
In addition, the combination $dq_i dp_i$ has the same units as $\hbar$.
And **Liouville's Theorem** states that the volume of a region of phase space is preserved by its time-evolution under Hamiltonian dynamics.

We also discussed **canonical transformations**, a generalization of coordinate transformations in which we make rotations which mix the (q, p) into the (Q, P) variables.
Sadly (?), we will not have time to further explore the utility and application of canonical transformations.