

Kapitel 2

Physikalische Grundlagen

In diesem Kapitel wollen wir einige relevante physikalische Konzepte einführen, die uns im Laufe der Vorlesung immer wieder begegnen werden. Es macht Sinn, zunächst einen Blick auf die klassische Mechanik zu werfen, welche den Lagrange- und Hamilton-Formalismus hervorgebracht hat. Später wollen wir den Übergang zu den ersten Entwicklungen der Quantenmechanik wagen, welche uns die Schrödinger-Gleichung liefern, die zentrale Gleichung unserer Vorlesung.

Anmerkung: In den physikalischen Teilen dieser Vorlesung werden bestimmte mathematische Begriffe eher “schwammig” formuliert/benutzt. Ebenso sind die hier angeführten Beweise nicht immer mathematisch komplett sauber, und sind aus der Sicht eines Mathematikers eher als Beweisideen zu verstehen. Dies hat allerdings den großen Vorteil, dass wir uns weniger Gedanken um die genauen Beweise machen müssen und schnell interessante Resultate erhalten.

2.1 Klassische Mechanik

In der Physik interessieren wir uns häufig für die Dynamik eines betrachteten Systems. Je nach Herangehensweise kann die Beschreibung dieser Dynamik mehr oder weniger kompliziert sein. Wir wollen im Folgenden den Lagrange-Formalismus “herleiten”, welcher in der Physik häufig zum Finden der Bewegungsgleichungen eingesetzt wird. Analog kann man den Hamilton-Formalismus einführen. Diesen kann man durch eine bestimmte Transformation aus dem Lagrange-Formalismus erhalten.

Resultat dieses Formalismus ist die sog. Hamilton-Funktion (oder Hamiltonian) als zentrales Konzept, welches auch dem späteren Hamilton-Operator zugrunde liegt, welcher uns in der Quantenmechanik (und in den mathematischeren Teilen dieser Vorlesung) verfolgen wird.

2.1.1 Variationsrechnung in der Physik

Für die Beschreibung physikalischer Systeme machen wir im Allgemeinen bestimmte Annahmen, die sich auf Beobachtungen stützen, oder fordern, dass wir “möglichst simple” Zusammenhänge als Gesetzmäßigkeiten erwarten. Eine der fundamentalsten Forderungen, die wir stellen, ist, dass die Energie in einem abgeschlossenen System erhalten bleibt. Somit kommt in unserem System keine zusätzliche Energie hinzu, und es verschwindet auch keine, es wird lediglich zwischen verschiedenen Energieformen umgewandelt.

Des Weiteren erwarten wir als Physiker, dass die Dynamik der betrachteten Systeme “möglichst einfach” ist. Diese Idee wollen wir zunächst an einem Beispiel betrachten und dann formalisieren.

Beispiel 2.1.1 (Snellius’sches Brechungsgesetz). Wir betrachten den Übergang eines Lichtstrahls zwischen zwei Medien (z.B. Luft und Glas, vgl. Abb. 2.1). Aus unserer Erfahrung wissen wir, dass sich ein Lichtstrahl innerhalb eines Mediums geradlinig ausbreitet und erst an der Grenzfläche gebrochen wird. Nach dem *Fermat’schen Prinzip*, folgt das Licht der Strecke, die mit der kürzesten Gesamtlaufzeit verbunden ist. Wie sieht dieser Weg in unserem Fall genau aus?

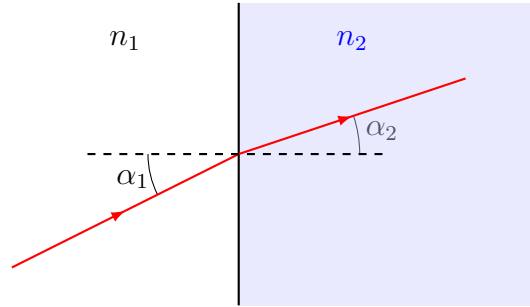


Abbildung 2.1: Übergang eines Lichtstrahls von einem Medium mit Brechungsindex n_1 in ein anderes mit Index n_2 .

Die Grenzfläche zwischen den beiden Medien liege bei $x = 0$. Das Licht startet in Medium 1 bei $(x_1, 0)$ mit $x_1 < 0$ und erreicht in Medium 2 den Punkt (x_2, y_2) mit $x_2 > 0$. Die Grenzfläche werde am Punkt $(0, y_G)$ getroffen. Im ersten Medium legt der Lichtstrahl also die Strecke $s_1 = \sqrt{x_1^2 + y_G^2}$ zurück, in Medium 2 die Strecke $s_2 = \sqrt{x_2^2 + (y_2 - y_G)^2}$. Die dafür benötigte Zeit in Abhängigkeit von der Position der Grenzfläche berechnet sich dann gemäß

$$T(y_G) = \frac{s_1}{c_0/n_1} + \frac{s_2}{c_0/n_2} = \frac{1}{c_0} \left(n_1 \sqrt{x_1^2 + y_G^2} + n_2 \sqrt{x_2^2 + (y_2 - y_G)^2} \right) \quad (2.1)$$

mit $y_G \in [0, y_2]$. Hierbei bezeichne $n_i = c_0/c_i$ den Brechungsindex für das jeweilige Medium. Die Zeit ist zu minimieren, d.h. wir betrachten die Ableitung

$$T'(y_G) = \frac{1}{c_0} \left(n_1 \frac{y_G}{\sqrt{x_1^2 + y_G^2}} - n_2 \frac{y_2 - y_G}{\sqrt{x_2^2 + (y_2 - y_G)^2}} \right) = \frac{1}{c_0} \left(n_1 \frac{y_G}{s_1(y_G)} - n_2 \frac{y_2 - y_G}{s_2(y_G)} \right). \quad (2.2)$$

Wir substituieren die eingezeichneten Winkel $\sin \alpha_1 = y_G/s_1$ sowie $\sin \alpha_2 = (y_2 - y_G)/s_2$ und verlangen, dass $T'(y_G) = 0$ für die kürzeste Strecke, sodass

$$0 = \frac{1}{c_0} (n_1 \sin \alpha_1 - n_2 \sin \alpha_2). \quad (2.3)$$

Umformen liefert dann schließlich das uns bekannte Snellius’sche Brechungsgesetz

$$n_1 \sin \alpha_1 = n_2 \sin \alpha_2. \quad (2.4)$$

Obiges Beispiel ist simpel zu berechnen und erfordert keine besonderen mathematischen Werkzeuge. Allgemeiner ist es aber wesentlich schwieriger, die korrekte Beschreibung der Dynamik eines Systems zu finden. Dazu nutzen wir in der Physik Funktionale, die wir im Rahmen der Variationsrechnung extremalisieren.

Definition 2.1.2. Sei V ein \mathbb{K} -Vektorraum, $\mathbb{K} \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$. Ein *Funktional* T ist eine Abbildung $T: V \rightarrow \mathbb{K}$.

Für unsere Zwecke werden Funktionale einen Funktionenraum als Vektorraum haben, d.h. ein Funktional ordnet einer Funktion f eine reelle (oder komplexe) Zahl zu (quasi als eine "Bewertung" der jeweiligen Funktion). Für Funktionale werden wir das Argument in eckige Klammern schreiben, sprich $T[f]$.

Um Extrempunkte von Funktionalen zu finden, bedienen wir uns der sogenannten *Variation* des Funktionals anstelle einer herkömmlichen Kurvendiskussion. Das Analogon zur Variation ist im herkömmlichen Fall der Begriff des Differentials.

2.1.2 Variation

Wir betrachten ein Funktional $T[f]$ für Funktionen $f(x)$. Weiter führen wir Funktionen $\varphi(x)$, genannt *Testfunktionen*, ein, mithilfe derer wir $f(x) + \epsilon\varphi(x)$ betrachten (für kleine ϵ).

Diese Funktionen $\varphi(x)$ sollen an den Randpunkten des Definitionsbereiches verschwinden. Das heißt im Beispiel der Bahnkurve von oben, dass wir Trajektorie immer noch zwischen dem gleichen Start- und Endpunkt verläuft, aber der Weg dazwischen verschieden aussehen kann.

Definition 2.1.3. Formal schreiben wir die Variation zu einem Funktional $T[f]$ und einer Funktion φ als

$$\delta T[f, \varphi] := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{T[f + \epsilon\varphi] - T[f]}{\epsilon} = \left. \frac{d}{d\epsilon} T[f + \epsilon\varphi] \right|_{\epsilon=0}. \quad (2.5)$$

Satz 2.1.4. Minimiert oder maximiert eine Funktion $f(x)$ das Funktional $T[f]$, so verschwindet die Variation, d.h. $\delta T[f, \varphi] = 0$ für alle zulässigen $\varphi(x)$.

Beweis. Sei $f(x)$ eine Funktion, die das Funktional $T[f]$ minimiere/maximiere, und $\varphi(x)$ bezeichne eine beliebige zulässige Testfunktion. Weiter führen wir die Funktion

$$t_\varphi(\epsilon) := T[f + \epsilon\varphi] \quad (2.6)$$

ein, wobei $\epsilon \in \mathbb{R}$. Ist $\epsilon = 0$, also $t_\varphi(\epsilon = 0) = T[f]$, so muss die Funktion t_φ an dieser Stelle ein Minimum/Maximum aufweisen. Daher gilt $\left. \frac{d}{d\epsilon} t_\varphi(\epsilon) \right|_{\epsilon=0} = 0$. Weiter gilt

$$\delta T[f, \varphi] = \left. \frac{d}{d\epsilon} T[f + \epsilon\varphi] \right|_{\epsilon=0} = \left. \frac{d}{d\epsilon} t_\varphi(\epsilon) \right|_{\epsilon=0}, \quad (2.7)$$

also verschwindet $\delta T[f, \varphi]$ für alle φ , wie gewünscht. \square

2.1.3 Lagrange-Formalismus

In der Physik wird häufig die sogenannte *Lagrange-Funktion* (auch: *Lagrangian*) genutzt, um ein System zu charakterisieren. Die Lagrange-Funktion $\mathcal{L}(t, q(t), \dot{q}(t))$ hängt von der Zeit t , und den sogenannten *verallgemeinerten Koordinaten* q und deren zeitlichen Ableitungen \dot{q} ab. Der Einfachheit halber betrachten wir hier lediglich eine verallgemeinerte Koordinate q anstelle von (beliebig) vielen q_i , $i \in \mathbb{N}$.

Eine verallgemeinerte Koordinate kann eine normale Position sein (z.B. die y -Komponente einer Bahnkurve), aber unter anderem auch ein Winkel. Die Lagrange-Funktion schreiben wir (vgl. theoretische Mechanik) häufig als

$$\mathcal{L} = T - V, \quad (2.8)$$

wobei T die kinetische Energie bezeichnet und V die potentielle Energie. Wir werden im Folgenden sehen, wie wir ein System mittels dieser Gleichung charakterisieren und durch weiteres Rechnen die zugehörigen Bewegungsgleichungen erhalten. Um die tatsächlich durchlaufene Bahn eines Körpers/Teilchens zu finden, müssen wir die sogenannte *Wirkung* S minimieren. Das Funktional der Wirkung ist definiert als

$$S[q] = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(t, q(t), \dot{q}(t)) dt. \quad (2.9)$$

Nun suchen wir also eine Funktion $q^*(t)$, welche die Wirkung $S[q]$ minimiert oder maximiert.

Satz 2.1.5. Jedes q^* , welches $S[q]$ minimiert/maximiert, erfüllt die *Euler-Lagrange-Gleichung*

$$\boxed{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}}. \quad (2.10)$$

Beweis. Sei q^* wie oben angegeben die Funktion, die $S[q]$ minimiert/maximiert. Wir betrachten nun $q = q^* + \epsilon\varphi$ mit $\epsilon \in \mathbb{R}$ und beliebigen zulässigen Testfunktionen φ . Dann ist die zugehörige Wirkung

$$S[q] = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(t, q(t), \dot{q}(t)) dt = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(t, q^*(t) + \epsilon\varphi(t), \dot{q}^*(t) + \epsilon\dot{\varphi}(t)) dt. \quad (2.11)$$

Den Integranden können wir als Taylor-Reihe in ϵ entwickeln, sodass

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(t, q^*(t) + \epsilon\varphi(t), \dot{q}^*(t) + \epsilon\dot{\varphi}(t)) &= \mathcal{L}(t, q^*(t), \dot{q}^*(t)) + \epsilon\varphi(t) \frac{\partial \mathcal{L}(t, q^*(t), \dot{q}^*(t))}{\partial q} \\ &\quad + \epsilon\dot{\varphi}(t) \frac{\partial \mathcal{L}(t, q^*(t), \dot{q}^*(t))}{\partial \dot{q}} + \mathcal{O}(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (2.12)$$

Damit lässt sich das Funktional umschreiben zu

$$S[q] = S[q^*] + \epsilon \int_{t_1}^{t_2} \left[\varphi(t) \frac{\partial \mathcal{L}(t, q^*(t), \dot{q}^*(t))}{\partial q} + \dot{\varphi}(t) \frac{\partial \mathcal{L}(t, q^*(t), \dot{q}^*(t))}{\partial \dot{q}} \right] dt + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (2.13)$$

Die Variation von S muss für alle zulässigen Testfunktionen φ verschwinden, d.h. $\delta S[q^*, \varphi] = 0$, sodass

$$\begin{aligned} 0 = \delta S[q^*, \varphi] &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{S[q^* + \epsilon\varphi] - S[q^*]}{\epsilon} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon \int_{t_1}^{t_2} \left[\varphi(t) \frac{\partial \mathcal{L}(t, q^*(t), \dot{q}^*(t))}{\partial q} + \dot{\varphi}(t) \frac{\partial \mathcal{L}(t, q^*(t), \dot{q}^*(t))}{\partial \dot{q}} \right] dt + \mathcal{O}(\epsilon^2)}{\epsilon} \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \left[\varphi(t) \frac{\partial \mathcal{L}(t, q^*(t), \dot{q}^*(t))}{\partial q} + \dot{\varphi}(t) \frac{\partial \mathcal{L}(t, q^*(t), \dot{q}^*(t))}{\partial \dot{q}} \right] dt. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Weiterhin erhalten wir mittels partieller Integration

$$\begin{aligned} \int_{t_1}^{t_2} \dot{\varphi}(t) \frac{\partial \mathcal{L}(t, q^*(t), \dot{q}^*(t))}{\partial \dot{q}} dt &= \left[\varphi(t) \frac{\partial \mathcal{L}(t, q^*(t), \dot{q}^*(t))}{\partial \dot{q}} \right]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \varphi(t) \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}(t, q^*(t), \dot{q}^*(t))}{\partial \dot{q}} dt \\ &= - \int_{t_1}^{t_2} \varphi(t) \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}(t, q^*(t), \dot{q}^*(t))}{\partial \dot{q}} dt. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Dabei haben wir im letzten Schritt die Definition der Testfunktionen mit $\varphi(t_1) = \varphi(t_2) = 0$ ausgenutzt. Also ist

$$0 = \delta S[q^*, \varphi] = \int_{t_1}^{t_2} \varphi(t) \left[\frac{\partial \mathcal{L}(t, q^*(t), \dot{q}^*(t))}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}(t, q^*(t), \dot{q}^*(t))}{\partial \dot{q}} \right] dt. \quad (2.16)$$

Obige Gleichung muss aber für alle zulässigen Testfunktionen $\varphi(t)$ erfüllt sein, sodass der restliche Integrand verschwinden muss und wir die Euler-Lagrange-Gleichung erhalten:

$$\frac{\partial \mathcal{L}(t, q^*(t), \dot{q}^*(t))}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}(t, q^*(t), \dot{q}^*(t))}{\partial \dot{q}} = 0. \quad (2.17)$$

□

Korollar 2.1.6 (Beltrami-Identität). Sei $\mathcal{L} = \mathcal{L}(q(t), \dot{q}(t))$ die Lagrange-Funktion eines Systems, welches nicht explizit von t abhängt. Dann ist

$$\boxed{\mathcal{L} - \dot{q}(t) \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} = \text{const.}} \quad (2.18)$$

Beweis. Es ist

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\mathcal{L} - \dot{q} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} \cdot \dot{q} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \cdot \ddot{q} - \ddot{q} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} - \dot{q} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) \\ &= \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) \right] \dot{q} = 0, \end{aligned} \quad (2.19)$$

da in der eckigen Klammer nichts anderes als die Euler-Lagrange-Gleichung steht. Dementsprechend ist $\mathcal{L} - \dot{q} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} = c$ für ein $c \in \mathbb{R}$. □

Beispiel 2.1.7. Wir betrachten ein Fadenpendel der Masse m und Länge l . Der Einfachheit halber schwingt das Pendel reibungsfrei in der x - y -Ebene (die Gravitation wirkt in y -Richtung) und die Masse m sei eine Punktmasse. In unserem Koordinatensystem lautet der Ortsvektor der Masse

$$\mathbf{r} = l \begin{pmatrix} \sin \theta \\ -\cos \theta \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \dot{\mathbf{r}} = l\dot{\theta} \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Damit hat die Lagrange-Funktion gemäß der theoretischen Mechanik die Form

$$\mathcal{L} = T - V = \frac{1}{2}m|\dot{\mathbf{r}}|^2 - mgy = \frac{1}{2}ml^2\dot{\theta}^2 + mgl \cos \theta. \quad (2.21)$$

Wir berechnen die für die Euler-Lagrange-Gleichung benötigten Ableitungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}} = \frac{d}{dt} (ml^2\dot{\theta}) = ml^2\ddot{\theta}, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta} = -mgl \sin \theta \quad (2.22)$$

und erhalten schließlich die Bewegungsgleichung

$$\ddot{\theta} = -\frac{g}{l} \sin \theta. \quad (2.23)$$

Wir sehen also, dass wir auf recht einfachem Wege, nämlich über das Erfassen der Energiebeiträge im System, an die Bewegungsgleichung kommen, die in diesem Fall die Bewegung des Pendels beschreibt. Die Lösung der Differentialgleichung kann je nach physikalischem System natürlich mehr oder weniger aufwändig werden.

In Vorlesungen wie der theoretischen Mechanik würden wir für das Beispiel des Fadenpendels die Kleinwinkelnäherung $\sin \theta \approx \theta$ für kleine Ausschläge verwenden. Damit hätten wir

$$\ddot{\theta} \approx -\frac{g}{l}\theta \quad (2.24)$$

und mit einem Exponentialansatz der Form $\exp(\lambda t)$ erhalten wir dann

$$\lambda^2 = -\frac{g}{l}. \quad (2.25)$$

Die Lösung der DGL lässt sich somit schreiben als

$$\theta(t) = C_1 \cos \left(\sqrt{\frac{g}{l}} t \right) + C_2 \sin \left(\sqrt{\frac{g}{l}} t \right) \quad (2.26)$$

mit Konstanten $C_1, C_2 \in \mathbb{R}$. Viele physikalische Prozesse können wir Schwingungsprozesse zurückführen bzw. auf ähnliche Weise beschreiben. Daher werden wir den harmonischen Oszillator auch in der Quantenmechanik wiederfinden. Wir sehen zudem, dass im Falle unseres Fadenpendels die charakteristische Frequenz von den Konstanten g, l (Erdbeschleunigung und Fadenlänge) abhängt und nicht von der Pendelmasse.

Beispiel 2.1.8. Ganz ähnlich zum Fadenpendel können wir ein Federpendel betrachten, bei dem eine Feder periodisch gestaucht und gestreckt wird. Auch hier wird kontinuierlich zwischen potentieller und kinetischer Energie umgewandelt. Wir betrachten die Auslenkung x unserer Masse m aus der Ruhelage $x = 0$. Wie stark sich die Feder stauchen lässt, hängt von ihrer Beschaffenheit (Federkonstante k) ab. Wir schreiben kinetische und potentielle Energie als

$$T = \frac{1}{2}m\dot{x}^2, \quad V = \frac{1}{2}kx^2, \quad (2.27)$$

sodass wir mit $\mathcal{L} = T - V$ die folgende Bewegungsgleichung erhalten:

$$\ddot{x} + \frac{k}{m}x = 0. \quad (2.28)$$

Wir sehen für die Lösung erneut die uns bekannten Sinus- und Cosinus-Schwingungen, hier allerdings mit charakteristischer Frequenz $\sqrt{k/m}$.

2.1.4 Hamilton-Formalismus

Der eben erlernte Lagrange-Formalismus ist ein mächtiges Werkzeug für die Arbeit in der klassischen Mechanik. Warum wollen wir also noch einen neuen Formalismus, den *Hamilton-Formalismus* einführen? Grund dafür, ist dass dieser aufgrund seiner leicht anderen Struktur rechen-technisch von Vorteil sein kann. Zudem entspricht die später eingeführte Hamilton-Funktion in einigen Fällen der Gesamtenergie unseres Systems und ist somit besser interpretierbar als die Lagrange-Funktion. Letztlich erlaubt der Hamilton-Formalismus auch einen besseren Übergang in die Quantenmechanik, mit der wir uns im Rahmen dieser Vorlesung auseinander setzen werden.

In der Lagrange-Mechanik hing unsere Funktion \mathcal{L} von den generalisierten Koordinaten q , den zugehörigen Geschwindigkeiten \dot{q} sowie der Zeit t ab. Statt der generalisierten Geschwindigkeiten wollen wir im Hamilton-Formalismus nun die konjugierten Impulse p verwenden, welche sich gemäß $p_i = \partial\mathcal{L}/\partial\dot{q}_i$ berechnen. Der von den zugelassenen Werten von q und p aufgespannte Raum wird *Phasenraum* genannt.

Um an unsere Hamilton-Funktion zu gelangen, gehen wir folgendermaßen vor: Das totale Differential des Lagrangian ist

$$d\mathcal{L} = \sum_i \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q_i} dq_i + \sum_i \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i. \quad (2.29)$$

Es gilt weiterhin

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q_i} = \dot{p}_i, \quad \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} = p_i. \quad (2.30)$$

Die liefert zusammen

$$\sum_i \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i = \sum_i p_i d\dot{q}_i = d\left(\sum_i p_i \dot{q}_i\right) - \sum_i \dot{q}_i dp_i, \quad (2.31)$$

sodass

$$d\left(\sum_i p_i \dot{q}_i - \mathcal{L}\right) = -\sum_i \dot{p}_i dq_i + \sum_i \dot{q}_i dp_i. \quad (2.32)$$

Die Größe auf der linken Seite stellt die Energie des Systems dar. Drücken wir diese durch die Koordinaten und Impulse aus, so bezeichnen wir sie als Hamilton-Funktion des Systems:

$$\mathcal{H}(p, q, t) = \sum_i p_i \dot{q}_i - \mathcal{L}. \quad (2.33)$$

2.1.5 Hamilton'sche Gleichungen

Aus dem Ausdruck

$$d\mathcal{H} = -\sum_i \dot{p}_i dq_i + \sum_i \dot{q}_i dp_i \quad (2.34)$$

erhalten wir

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}. \quad (2.35)$$

Die totale zeitliche Ableitung des Hamiltonians ist

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{H}}{dt} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \dot{p}_i \\ &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Damit gilt also

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t}. \quad (2.37)$$

Beispiel 2.1.9. Wir betrachten ein freies Teilchen mit Masse m , d.h. wir haben kein Potential V , welches auf das Teilchen wirkt ($V = 0$). Dementsprechend ist der Lagrangian hier

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) = T. \quad (2.38)$$

Die x -Komponente des Impulses berechnet sich gemäß $p_x = \partial \mathcal{L} / \partial \dot{x} = m\dot{x}$ (andere Komponenten analog). Der Hamiltonian lautet

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{i=1}^3 p_i \dot{q}_i - \mathcal{L} \\ &= \frac{1}{m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) \\ &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \end{aligned} \quad (2.39)$$

wobei wir im letzten Schritt die \dot{q}_i durch die Impulse ausgedrückt haben, da unsere Hamiltonfunktion am Schluss nur noch von den q_i und p_i abhängen soll.

2.1.6 Poisson-Klammern und Bewegungsintegrale

Definition 2.1.10. Es seien $f(p, q, t)$ und $g(p, q, t)$ beliebige Funktionen der Koordinaten, der Impulse und der Zeit. Die *Poisson-Klammer* definieren wir als

$$\{f, g\} = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} - \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} \right). \quad (2.40)$$

Anmerkung: In manchen Quellen wird für die Poisson-Klammern eine andere Vorzeichenkonvention gewählt.

Definition 2.1.11. Funktionen von dynamischen Veränderlichen, die bei der Bewegung erhalten bleiben, heißen *Bewegungsintegrale*. Die totale zeitliche Ableitung einer Funktion f können wir als

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{\mathcal{H}, f\} \quad (2.41)$$

schreiben. Wenn das Bewegungsintegral nicht explizit von der Zeit abhängt, so ist $\{\mathcal{H}, f\} = 0$.

Satz 2.1.12. Die Poisson-Klammern besitzen folgende Eigenschaften:

1. $\{f, g\} = -\{g, f\}$,
2. $\{f, c\} = 0$ für eine Konstante c ,
3. $\{f_1 + f_2, g\} = \{f_1, g\} + \{f_2, g\}$,
4. $\{f_1 f_2, g\} = f_1 \{f_2, g\} + f_2 \{f_1, g\}$,
5. $\{\{f, g\}, h\} + \{\{g, h\}, f\} + \{\{h, f\}, g\} = 0$. (Jacobi-Identität)

Beweis. Übungsaufgabe. Keine der Identitäten ist sonderlich schwierig zu zeigen, nur die Jacobi-Identität ist viel Schreibaarbeit. \square

Satz 2.1.13. Für eine Funktion f wie oben und eine generalisierte Koordinate q_k bzw. einen Impuls p_k gilt

$$\{f, q_k\} = \frac{\partial f}{\partial p_k}, \quad \{f, p_k\} = -\frac{\partial f}{\partial q_k}. \quad (2.42)$$

Weiterhin gilt

$$\{q_i, q_k\} = 0, \quad \{p_i, p_k\} = 0, \quad \{p_i, q_k\} = \delta_{ik}. \quad (2.43)$$

Beweis. Folgt direkt aus den Ableitungen

$$\frac{\partial q_i}{\partial q_k} = \delta_{ik} = \frac{\partial p_i}{\partial p_k}, \quad \frac{\partial q_i}{\partial p_k} = 0 = \frac{\partial p_i}{\partial q_k}. \quad (2.44)$$

\square

Satz 2.1.14. Es seien f, g zwei Bewegungsintegrale. Dann ist die aus den beiden gebildete Poisson-Klammer ebenfalls ein Bewegungsintegral, d.h.

$$\frac{d}{dt}\{f, g\} = 0. \quad (2.45)$$

Beweis.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\{f, g\} &= \frac{\partial}{\partial t}\{f, g\} + \{\mathcal{H}, \{f, g\}\} \\ &= \left\{ \frac{\partial f}{\partial t}, g \right\} + \left\{ f, \frac{\partial g}{\partial t} \right\} - \{f, \{g, \mathcal{H}\}\} - \{g, \{\mathcal{H}, f\}\} \\ &= \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} + \{\mathcal{H}, f\}, g \right\} + \left\{ f, \frac{\partial g}{\partial t} + \{\mathcal{H}, g\} \right\} \\ &= \left\{ \frac{df}{dt}, g \right\} + \left\{ f, \frac{dg}{dt} \right\} = 0. \end{aligned} \quad (2.46)$$

□