

KAPITEL V

Hamilton-Formalismus

V.1	Hamiltonsche Bewegungsgleichungen	106
V.1.1	Kanonisch konjugierter Impuls	107
V.1.2	Hamilton-Funktion	107
V.1.3	Kanonische Bewegungsgleichungen	108
V.1.4	Beispiele	110
V.2	Phasenraum	111
V.2.1	Phasenraumtrajektorien	111
V.2.2	Satz von Liouville	115
V.3	Poisson-Mechanik	118
V.3.1	Phasenraum-Funktionen	118
V.3.2	Poisson-Klammer	118
V.3.3	Poisson-Klammer und Zeitentwicklung	120
V.3.4	Kanonische Transformationen	122
V.3.5	Poisson-Klammer und Symmetrien	125

Dieses Kapitel befasst sich mit einer weiteren Formulierung der klassischen Mechanik. Diese beruht auf alternativen Variablen — den (verallgemeinerten) Koordinaten und den dazu konjugierten Impulsen —, woraus natürlich neue Bewegungsgleichungen folgen, die sog. *Hamilton-Gleichungen* (Abschn. V.1). Die möglichen Lösungen dieser Gleichungen für ein bestimmtes physikalisches System lassen sich auf natürliche Weise interpretieren als die Trajektorien eines fiktiven Punkts in einem (meistens) hochdimensionalen Raum, dem *Phasenraum* des Systems (Abschn. V.2). Schließlich wird in Abschn. V.3 eine alternative Form der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen eingeführt. Anhand dieser Form kann der Zusammenhang zwischen Erhaltungsgrößen und Symmetrien eines Systems leicht ausgedrückt werden.

Wie wir hiernach sehen werden, besitzen die Grundgleichungen der Hamilton-Formulierung einen größeren Grad an Symmetrie als im Lagrange-Formalismus, was natürlich „ästhetisch“ wirkt — was bei manchen theoretischen Physikern wichtig ist. Daneben ist der Hamilton-Formalismus aus zwei anderen Gründen interessant. Zum einen nähert er sich am meistens dem kanonischen Formalismus der Quantenmechanik. Zum anderen stellt er auch einen natürlichen Rahmen für die Formulierung der (klassischen) statistischen Mechanik von Vielteilchensystemen dar.

V.1 Hamiltonsche Bewegungsgleichungen

In diesem Abschnitt werden die Grundlagen der Hamilton-Formulierung der klassischen Mechanik eingeführt, und zwar die Grundvariablen (§ V.1.1) und die davon abhängige Grundgröße (§ V.1.2), sowie die Bewegungsgleichungen (§ V.1.3). Die ganze Konstruktion wird dann in § V.1.4 auf einige Beispiele angewandt.

V.1.1 Kanonisch konjugierter Impuls

Sei ein mechanisches System mit s Freiheitsgraden. Im Rahmen des im Kap. III eingeführten Lagrange-Formalismus benutzt man zur Beschreibung dieses Systems und dessen Zeitentwicklung einerseits s verallgemeinerte Koordinaten

$$\mathbf{q} \equiv \{q^\alpha\}_{\alpha=1,\dots,s} \quad (\text{V.1a})$$

und andererseits die zugehörigen verallgemeinerten Geschwindigkeiten

$$\dot{\mathbf{q}} \equiv \{\dot{q}^\alpha\}_{\alpha=1,\dots,s}. \quad (\text{V.1b})$$

Zusammen mit der Zeit bilden die generalisierten Koordinaten und Geschwindigkeiten die $2s + 1$ Argumente der Lagrange-Funktion $\mathcal{L}(t, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$, die die ganze Information über das System enthält.

Mithilfe der Lagrange-Funktion werden noch die verallgemeinerten Impulse definiert; somit ist

$$p_\alpha \equiv \frac{\partial \mathcal{L}(t, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})}{\partial \dot{q}^\alpha} \quad (\text{V.1c})$$

der zur Koordinate q^α konjugierte Impuls.

Im Folgenden werden diese Impulse kollektiv mit

$$\mathbf{p} \equiv \{p_\alpha\}_{\alpha=1,\dots,s} \quad (\text{V.1d})$$

bezeichnet.

Die Grundidee des Hamilton-Formalismus besteht darin, den Bewegungszustand eines mechanischen Systems zur Zeit t durch die verallgemeinerten Koordinaten $\{q^\alpha\}$ und die dazu konjugierten Impulse $\{p_\alpha\}$ zu charakterisieren, statt durch die Variablen $\{q^\alpha\}$, $\{\dot{q}^\alpha\}$.

Definition: Der von den $2s$ Variablen $\{q^\alpha\}$ und $\{p_\alpha\}$ aufgespannte Raum Γ heißt *Phasenraum* des Systems. Dementsprechend werden die $\{q^\alpha\}$ und $\{p_\alpha\}$ für $\alpha \in \{1, \dots, s\}$ gemeinsam *Phasenraumkoordinaten* genannt.

Jedem möglichen Bewegungszustand eines gegebenen Systems wird ein Punkt in dessen Phasenraum Γ zugeordnet, und die Bewegung entspricht einer Phasenraumtrajektorie. Dieses Thema wird im Abschn. V.2 ausführlicher diskutiert.

Bemerkung: Der Phasenraum ist im Allgemeinen kein Vektorraum, weil einige Variablen — wie z.B. Winkel — ihre Werte nur in einem endlichen Intervall von \mathbb{R} annehmen können.

Mathematisch ist der Phasenraum eine *Mannigfaltigkeit* der Dimension $2s$.

V.1.2 Hamilton-Funktion

Um die Variablen $\{q^\alpha\}$, $\{\dot{q}^\alpha\}$ des Lagrange-Formalismus durch die Koordinaten $\{q^\alpha\}$ und die konjugierten Impulse $\{p_\alpha\}$ zu ersetzen, muss eine Funktion der neuen Variablen definiert werden, welche die gesamte Information über das System enthält, um die Rolle der Lagrange-Funktion zu übernehmen.

Definition: Gegeben die Lagrange-Funktion eines System wird seine *Hamilton-Funktion* durch

$$\mathcal{H}(t, \mathbf{q}, \mathbf{p}) \equiv \sum_{\alpha=1}^s p_\alpha \dot{q}^\alpha - \mathcal{L}(t, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \quad (\text{V.2})$$

definiert.

Auf der rechten Seite dieser Definition sollen die Geschwindigkeiten \dot{q}^α als Funktionen der Zeit t und der Phasenraumkoordinaten $\{q^\beta\}$ und $\{p_\beta\}$ betrachtet werden: $\dot{q}^\alpha = \dot{q}^\alpha(t, \mathbf{q}, \mathbf{p})$. Das heißt, dass die definierende Beziehung des konjugierten Impulses (V.1c) invertiert werden soll. Wenn dies möglich ist, gilt bei festen $\{p_\beta\}_{\beta=1,\dots,s}$

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \dot{q}^\alpha} = \frac{\partial}{\partial \dot{q}^\alpha} \left(\sum_{\beta=1}^s p_\beta \dot{q}^\beta - \mathcal{L} \right) = p_\alpha - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}^\alpha} = 0,$$

d.h. \mathcal{H} hängt nicht explizit von \dot{q}^α ab.

Laut dem Satz von der Umkehrabbildung soll die Determinante der $s \times s$ -Matrix mit Elementen $\partial^2 \mathcal{L} / \partial \dot{q}^\alpha \partial \dot{q}^\beta$ ungleich Null sein, damit Gl. (V.1c) lokal invertierbar sei; vgl. auch Anhang D.

Wie oben erwähnt muss die Hamilton-Funktion \mathcal{H} die gleiche Information wie die Lagrange-Funktion \mathcal{L} enthalten. Dass dies der Fall ist, lässt sich beweisen, indem man \mathcal{L} aus \mathcal{H} rekonstruieren kann.

Sei somit angenommen, dass die Hamilton-Funktion $\mathcal{H}(t, \mathbf{q}, \mathbf{p})$ bekannt ist. Definiert man zunächst

$$\dot{Q}^\alpha \equiv \frac{\partial \mathcal{H}(t, \mathbf{q}, \mathbf{p})}{\partial p_\alpha},$$

so folgt aus Gl. (V.2) und der Kettenregel

$$\dot{Q}^\alpha = \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left(\sum_{\beta=1}^s p_\beta \dot{q}^\beta - \mathcal{L} \right) = \dot{q}^\alpha + \sum_{\beta=1}^s p_\beta \frac{\partial \dot{q}^\beta}{\partial p_\alpha} - \sum_{\beta=1}^s \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q^\beta} \frac{\partial q^\beta}{\partial p_\alpha} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}^\beta} \frac{\partial \dot{q}^\beta}{\partial p_\alpha} \right).$$

Unter Verwendung von $\partial q^\beta / \partial p_\alpha = 0$, entsprechend der Unabhängigkeit der Variablen q_β und p_α , und der Beziehung (V.1c) im letzten Term kommt dann $\dot{Q}^\alpha = \dot{q}^\alpha$. Somit lassen sich die verallgemeinerten Geschwindigkeiten aus der Hamilton-Funktion über

$$\dot{q}^\alpha(t, \mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{\partial \mathcal{H}(t, \mathbf{q}, \mathbf{p})}{\partial p_\alpha} \quad (\text{V.3a})$$

wiederfinden. Dann liefert eine einfache Berechnung

$$\sum_{\alpha=1}^s p_\alpha \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\alpha} - \mathcal{H} = \sum_{\alpha=1}^s p_\alpha \dot{q}^\alpha - \left(\sum_{\alpha=1}^s p_\alpha \dot{q}^\alpha - \mathcal{L} \right) = \mathcal{L}.$$

Das heißt, die Lagrange-Funktion kann aus der Hamilton-Funktion gemäß

$$\mathcal{L}(t, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \equiv \sum_{\alpha=1}^s p_\alpha \dot{q}^\alpha(t, \mathbf{q}, \mathbf{p}) - \mathcal{H}(t, \mathbf{q}, \mathbf{p}) \quad (\text{V.3b})$$

rekonstruiert werden, wobei \dot{q}^α durch Gl. (V.3a) gegeben ist.

Mathematisch ist der Übergang von \mathcal{L} zu \mathcal{H} ein Beispiel von *Legendre^(u)-Transformation*,⁽⁴⁷⁾ und der Übergang von \mathcal{H} zu \mathcal{L} ist die Rücktransformation (*inverse Legendre-Transformation*).

Bemerkung: Vergleicht man Gl. (V.2) mit Gl. (III.35c), so stimmt die Definition der Hamilton-Funktion mit jener der Noether-Ladung überein, die mit Invarianz unter Zeittranslationen assoziiert und als gesamte Energie des Systems interpretiert wurde.

⁽⁴⁷⁾S. Anhang D.

^(u)A.-M. LEGENDRE, 1752–1833

V.1.3 Kanonische Bewegungsgleichungen

Die Position eines Systems im Phasenraum zu einer gegebenen Zeit t gibt seine verallgemeinerten Koordinaten und konjugierten Impulse zu diesem Zeitpunkt, die hiernach mit $\{q^\alpha(t)\}$ und $\{p_\alpha(t)\}$ bezeichnet werden. Zur Charakterisierung der Bewegung des Systems sind noch Bewegungsgleichungen erforderlich, welche die Zeitentwicklung von den $\{q^\alpha(t)\}$ und $\{p_\alpha(t)\}$ bestimmen.

Im vorigen Paragraphen wurde schon Gl. (V.3a) gefunden, welche die Zeitableitung der verallgemeinerten Koordinate $q^\alpha(t)$ durch Größen des Hamilton-Formalismus ausdrückt. Betrachtet man jetzt die Ableitung der Hamilton-Funktion (V.2) nach der verallgemeinerten Koordinate q^α , so ergibt sich

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q^\alpha} = \frac{d\mathcal{H}}{dq^\alpha} = \frac{d}{dq^\alpha} \left(\sum_{\beta=1}^s p_\beta \dot{q}^\beta - \mathcal{L} \right) = \sum_{\beta=1}^s p_\beta \frac{\partial \dot{q}^\beta}{\partial q^\alpha} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q^\alpha} - \sum_{\beta=1}^s \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}^\beta} \frac{\partial \dot{q}^\beta}{\partial q^\alpha}.$$

Im letzten Summanden kann $\partial \mathcal{L} / \partial \dot{q}^\beta$ durch p_β ersetzt werden, so dass dieser Term sich mit dem ersten herauskürzt. Wird der zweite Term $\partial \mathcal{L} / \partial q^\alpha$ dann im Punkt $(t, \mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t))$ der Trajektorie des Systems ausgewertet, so ist er laut der Euler-Lagrange-Gleichung (III.11) gleich der Zeitableitung von $\partial \mathcal{L} / \partial \dot{q}^\alpha$. Nach Gl. (V.1c) ist dies auch die Zeitableitung des konjugierten Impulses p_α . Somit ergibt sich

$$\frac{\partial \mathcal{H}(t, \mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))}{\partial q^\alpha} = - \frac{dp_\alpha(t)}{dt}.$$

Insgesamt gelten die (*kanonischen*) *Hamiltonschen Gleichungen*

$$\begin{aligned} \frac{dq^\alpha(t)}{dt} &= \frac{\partial \mathcal{H}(t, \mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))}{\partial p_\alpha} \\ \frac{dp_\alpha(t)}{dt} &= - \frac{\partial \mathcal{H}(t, \mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))}{\partial q^\alpha} \end{aligned} \quad \text{für } \alpha = 1, \dots, s. \quad (\text{V.4})$$

Im Gegensatz zum zweiten newtonschen Gesetz (I.14) oder zu den Euler-Lagrange-Gleichungen (III.11), die zweiter Ordnung sind, sind die $2s$ Hamiltonschen Bewegungsgleichungen Differentialgleichungen erster Ordnung. Daher ist für jede Phasenraumkoordinate nur eine einzige Anfangsbedingung nötig, um die Lösung der Bewegungsgleichungen, d.h. die Phasenraumtrajektorie, zu bestimmen.

Bemerkungen:

* Die totale Ableitung der Hamilton-Funktion nach der Zeit gibt unter Verwendung der Kettenregel und der Hamiltonschen Gleichungen (V.4)

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q^\alpha} \dot{q}^\alpha + \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\alpha} \dot{p}_\alpha = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^s (-\dot{p}_\alpha \dot{q}^\alpha + \dot{q}^\alpha \dot{p}_\alpha) = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t}.$$

Falls die Hamilton-Funktion nicht explizit von der Zeit abhängt ($\partial \mathcal{H} / \partial t = 0$), ist sie somit eine Konstante der Bewegung, entsprechend Energieerhaltung im System.

* Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (V.4) können aus einem Extremalprinzip, dem schon angetroffenen Hamilton(!)-Prinzip (III.10), hergeleitet werden. Demgemäß ist die Wirkung

$$S[\mathbf{q}, \mathbf{p}] \equiv \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_{\alpha=1}^s p_\alpha(t) \dot{q}^\alpha(t, \mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)) - \mathcal{H}(t, \mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)) \right] dt \quad (\text{V.5})$$

unter allen Phasenraumtrajektorien mit festen Endpunkten extremal für die physikalisch realisierte Bewegung.

V.1.4 Beispiele

V.1.4 a Allgemeines eindimensionales System

Das einfachste Beispiel ist das eines zeittranslationsinvarianten Systems mit einem einzigen Freiheitsgrad, der durch eine verallgemeinerte Koordinate q parametrisiert wird. Sei

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}) = \frac{m}{2} \dot{q}^2 - V(q) \quad (\text{V.6a})$$

die zugehörige Lagrange-Funktion, mit dem Potential V für die generalisierte Koordinate. Der zu q konjugierte Impuls ist

$$p \equiv \frac{\partial \mathcal{L}(q, \dot{q})}{\partial \dot{q}} = m\dot{q}, \quad (\text{V.6b})$$

woraus $\dot{q}(t, q, p) = p/m$ folgt.

Die Hamilton-Funktion (V.2) für dieses System lautet

$$\mathcal{H}(q, p) \equiv p\dot{q} - \mathcal{L}(q, \dot{q}) = m\dot{q}^2 - \frac{m}{2}\dot{q}^2 + V(q) = \frac{m}{2}\dot{q}^2 + V(q).$$

Ersetzt man \dot{q} durch p/m , so ergibt sich schließlich

$$\mathcal{H}(q, p) = \frac{p^2}{2m} + V(q). \quad (\text{V.6c})$$

Ausgehend von dieser Hamilton-Funktion lauten die Hamiltonschen Gleichungen (V.4)

$$\frac{dq(t)}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}(q(t), p(t))}{\partial p} = \frac{p(t)}{m} \quad (\text{V.6d})$$

und

$$\frac{dp(t)}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}(q(t), p(t))}{\partial q} = -\frac{\partial V(q(t))}{\partial q}. \quad (\text{V.6e})$$

Wird die zweite in der Ableitung der ersten nach der Zeit eingesetzt, so findet man die „übliche“ Bewegungsgleichung des Lagrange-Formalismus wieder.

Schließlich kann man schnell nachprüfen, dass die Lagrange-Funktion aus der Hamilton-Funktion rekonstruiert werden kann (s. Gl. (V.3b)):

$$p \frac{\partial \mathcal{H}(q, p)}{\partial p} - \mathcal{H}(q, p) = p \frac{p}{m} - \frac{p^2}{2m} - V(q) = \frac{p^2}{2m} - V(q).$$

V.1.4 b Harmonischer Oszillator

Ein wichtiges Beispiel für die im letzten Paragraphen gefundenen Ergebnisse ist das des eindimensionalen harmonischen Oszillators mit Potential $V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$. Mit der Hamilton-Funktion

$$\mathcal{H}(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2, \quad (\text{V.7})$$

lauten die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\frac{dq(t)}{dt} = \frac{p(t)}{m} \quad (\text{V.8a})$$

$$\frac{dp(t)}{dt} = -m\omega^2 q(t). \quad (\text{V.8b})$$

Diese zwei gekoppelten Differentialgleichungen können natürlich kombiniert werden, um die übliche Differentialgleichung zweiter Ordnung $m\ddot{q}(t) + m\omega^2 q(t) = 0$ zu geben. Stattdessen wird hiernach eine geeignete Linearkombination von $q(t)$ und $p(t)$ eingeführt, um eine einfach lösbare Gleichung erster Ordnung zu erhalten.

Sei

$$\alpha(t) \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2}} q(t) + i \frac{p(t)}{\sqrt{2m\omega}}. \quad (\text{V.9})$$

Die Phasenraumtrajektorie lässt sich durch $\alpha(t)$ und die komplex konjugierte Funktion $\alpha(t)^*$ ausdrücken:

$$q(t) = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}} [\alpha(t) + \alpha(t)^*] = \sqrt{\frac{2}{m\omega}} \operatorname{Re} \alpha(t) \quad (\text{V.10a})$$

$$p(t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2}} \frac{\alpha(t) - \alpha(t)^*}{i} = \sqrt{2m\omega} \operatorname{Im} \alpha(t) \quad (\text{V.10b})$$

wobei $\operatorname{Re} \alpha(t)$ bzw. $\operatorname{Im} \alpha(t)$ den Realteil bzw. Imaginärteil von $\alpha(t)$ bezeichnet. Die Summe aus Gl. (V.8a), multipliziert mit $\sqrt{m\omega/2}$, und Gl. (V.8b) multipliziert mit $i/\sqrt{2m\omega}$ gibt

$$\frac{d\alpha(t)}{dt} = -i\omega \alpha(t). \quad (\text{V.11})$$

Diese gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung lässt sich sofort lösen: wenn α_0 die Anfangsbedingung bei $t = 0$ bezeichnet, gilt

$$\alpha(t) = \alpha_0 e^{-i\omega t}, \quad (\text{V.12})$$

woraus $q(t)$ und $p(t)$ über Gl. (V.10) folgen. Insbesondere ergibt sich das bekannte oszillatorische Verhalten von $q(t)$.

Bemerkung: Man kann noch die Hamilton-Funktion durch die Variablen α , α^* ausdrücken:

$$\mathcal{H} = \omega \alpha^* \alpha.$$

Die Transformation $(q, p) \rightarrow (\alpha, \alpha^*)$ ist aber keine kanonische Transformation (vgl. § V.3.4).