

6.3. Kanonische Transformationen

Wir schreiben $z = (z_1, \dots, z_{2N}) = (q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$.

• Die **Hamiltonschen Gleichungen** sind

$$-\sum_{k=1}^{2N} \varepsilon_{ik} \dot{z}_k = \frac{\partial H}{\partial z_i}, \text{ wobei } \varepsilon_{ik} = \begin{cases} -1, & \text{wenn } i = k+N \\ +1, & \text{wenn } i = k-N \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

$$(\Rightarrow (\varepsilon_{ik}) = \begin{pmatrix} 0_{N \times N} & I_{N \times N} \\ -I_{N \times N} & 0_{N \times N} \end{pmatrix}.)$$

• **Poisson-Klammern** können geschrieben werden als

$$\{f, g\} = \sum_{k,l=1}^{2N} \frac{\partial f}{\partial z_k} \varepsilon_{kl} \frac{\partial g}{\partial z_l} = \left(\frac{\partial f}{\partial z} \right)^T \varepsilon \left(\frac{\partial g}{\partial z} \right).$$

Definition: Eine **kanonische Transformation** ist eine (invertierbare)

Koordinatentransformation $z_i = z_i(\bar{z}_1, \dots, \bar{z}_{2N})$, die die Form von Poisson-Klammern erhält. D.h. ist $\bar{f}(\bar{z}) = f(z)$, $\bar{g}(\bar{z}) = g(z)$, so muss gelten

$$\{f, g\}(z(\bar{z})) = \sum_{k,l=1}^{2N} \frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{z}_k} \varepsilon_{kl} \frac{\partial \bar{g}}{\partial \bar{z}_l}(\bar{z})$$

Bemerkung. Äquivalent: für $(Q^1, \dots, Q^N, P_1, \dots, P_N) = \bar{z}$ gilt

$$\{Q^\alpha, Q^\beta\} = 0 = \{P_\alpha, P_\beta\}, \quad \{Q^\alpha, P_\beta\} = \delta^\alpha_\beta. \quad (\text{Vgl. } \otimes.)$$

Behauptung: $z = z(\bar{z})$ ist eine **kanonische Abbildung**

$$\Leftrightarrow \text{Für die Jacobi-Matrix } A_{ij}(\bar{z}) = \frac{\partial z_i}{\partial \bar{z}_j}(\bar{z}) \text{ gilt}$$

$$A^T \varepsilon A = \varepsilon \quad (\text{für alle } \bar{z}). \quad (\text{"Die Matrix } A \text{ ist symplektisch."})$$

Beweis: Wir berechnen zunächst

$$\frac{\partial \bar{g}}{\partial \bar{z}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \bar{g}}{\partial \bar{z}_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial \bar{g}}{\partial \bar{z}_N} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial z_1}{\partial \bar{z}_1} & \dots & \frac{\partial z_N}{\partial \bar{z}_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial z_1}{\partial \bar{z}_N} & \dots & \frac{\partial z_N}{\partial \bar{z}_N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial g}{\partial z_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial g}{\partial z_N} \end{pmatrix} = A^T \frac{\partial g}{\partial z}.$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial f}{\partial \bar{z}} \right)^T \varepsilon \left(\frac{\partial \bar{g}}{\partial \bar{z}} \right) = \left(A^T \frac{\partial f}{\partial z} \right)^T \varepsilon \left(A^T \frac{\partial g}{\partial z} \right) \\ = \left(\frac{\partial f}{\partial z} \right)^T A \varepsilon A^T \left(\frac{\partial g}{\partial z} \right).$$

Damit dies für alle f, g gleich $\{f, g\} = \left(\frac{\partial f}{\partial z} \right)^T \varepsilon \left(\frac{\partial g}{\partial z} \right)$ ist, muss also gelten $A \varepsilon A^T = \varepsilon$ (für alle \bar{z}).

$$\Leftrightarrow \underbrace{(A^T)^{-1}}_{-\varepsilon} \underbrace{\varepsilon^{-1}}_{-\varepsilon} A^{-1} = \varepsilon^{-1} \Leftrightarrow \varepsilon = A^T \varepsilon A.$$

Behauptung: Ist $z = z(\bar{z})$ eine kanonische Transformation und $\bar{H}(\bar{z}) = H(z(\bar{z}))$, so lauten die Hamilton-Gleichungen $-\sum_k \varepsilon_{ik} \dot{z}_k = \frac{\partial H}{\partial z_i}$ in \bar{z} -Koordinaten genauso: $-\sum_k \varepsilon_{ik} \dot{\bar{z}}_k = \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{z}_i}$.

$$\text{Beweis: } -\sum_k \varepsilon_{ik} \dot{z}_k = -\sum_{k,l} \varepsilon_{ik} A_{kl} \dot{\bar{z}}_l \\ \parallel \\ \frac{\partial H}{\partial z_i} = \sum_j \frac{\partial \bar{z}_j}{\partial z_i} \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{z}_j} = \sum_j (A^{-1})_{ji} \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{z}_j}.$$

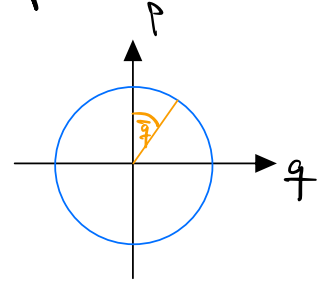
Mit A_{im} multiplizieren und über i summieren:

$$\frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{z}_m} \left(= \sum_j \underbrace{\left(\sum_i (A^{-1})_{ji} A_{im} \right)}_{\delta_{mj}} \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{z}_j} \right) = - \sum_l \underbrace{\left(\sum_{i,k} A_{im} \varepsilon_{ik} A_{kl} \right)}_{= (A^T \varepsilon A)_{ml} \stackrel{\uparrow}{=} \varepsilon_{ml}} \dot{\bar{z}}_l \\ \text{kanonische Transformation}$$

$$= - \sum_l \varepsilon_{ml} \dot{\bar{z}}_l. \quad \text{_____}$$

Beispiele. (1) Harmonischer Oszillator: $H = \frac{1}{2} p^2 + \frac{1}{2} q^2$.

Betrachten die Transformation $\bar{p} = \frac{1}{2} p^2 + \frac{1}{2} q^2$
 $\bar{q} = \arctan\left(\frac{q}{p}\right)$.



Also $\bar{z} = \begin{pmatrix} \bar{q} \\ \bar{p} \end{pmatrix} = \bar{z}(z)$, $z = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$.

Berechnen

$$A = \frac{\partial \bar{z}}{\partial z} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \bar{q}}{\partial q} & \frac{\partial \bar{q}}{\partial p} \\ \frac{\partial \bar{p}}{\partial q} & \frac{\partial \bar{p}}{\partial p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{p}{q^2+p^2} & -\frac{q}{q^2+p^2} \\ q & p \end{pmatrix}.$$

Haben $A^T \varepsilon A = \varepsilon$ ($= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$) durch direkte Rechnung.

$\Rightarrow \bar{z} = \bar{z}(z)$ ist eine kanonische Transformation.

$$\bar{H}(\bar{z}) = \bar{p}.$$

\Rightarrow Hamiltonsche Gleichungen:
$$\begin{cases} \dot{\bar{q}} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{p}} = 1 \\ \dot{\bar{p}} = -\frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{q}} = 0. \end{cases}$$

Trivial zu lösen!
$$\begin{cases} \bar{q}(t) = \bar{q}(0) + t \\ \bar{p}(t) = \bar{p}(0). \end{cases}$$

In den ursprünglichen Koordinaten gilt also
$$\begin{cases} q(t) = q(0) \cos t + p(0) \sin t \\ p(t) = p(0) \cos t - q(0) \sin t. \end{cases}$$

(2) Jede Transformation $\bar{q} = \bar{q}(q)$ induziert eine kanonische Transformation

via
$$\bar{p}_\alpha = \sum_{\beta=1}^N \frac{\partial q_\beta}{\partial \bar{q}^\alpha} p_\beta.$$

Satz: Kanonische Transformationen $\phi: z \mapsto \bar{z}$ sind volumenschaltend:

$$\int_{\Omega} dz_1 \cdots dz_{2N} = \int_{\phi(\Omega)} d\bar{z}_1 \cdots d\bar{z}_{2N}.$$

Beweis: $\int_{\phi(\Omega)} d\bar{z}_1 \cdots d\bar{z}_{2N} = \int_{\Omega} \underbrace{\left| \det \left(\frac{\partial \bar{z}_i}{\partial z_j} \right)_{i,j=1,\dots,2N} \right|}_{=: A} dz_1 \cdots dz_{2N}.$

Aber $A^T \varepsilon A = \varepsilon$ impliziert

$$1 = |\det \varepsilon| = |\det (A^T \varepsilon A)| = |\det A|^2,$$

also $|\det A| = 1$.

6.3.1. Kanonische Flüsse

Die Dynamik eines zeitunabhängigen Hamiltonschen Systems definiert eine Schar kanonischer Transformationen:

Satz: $H = H(z)$ Hamiltonfunktion (oder irgendeine Funktion auf dem Phasenraum). Definieren $\phi_t(z) = z(t)$, $t \in \mathbb{R}$, $z \in \mathbb{R}^{2N}$, wobei $z(t)$ die Hamilton-Gleichungen löst $(-\sum_{k=1}^{2N} \varepsilon_{ik} \dot{z}_k = \frac{\partial H}{\partial z_i})$.

Dann ist ϕ_t eine kanonische Transformation.

($\{\phi_t\}_{t \in \mathbb{R}}$ heisst kanonischer Fluss.)

Beweis: • Seien f, g Funktionen auf dem Phasenraum, und

$$f_t(z) = f(\phi_t(z)), \quad g_t(z) = g(\phi_t(z)).$$

• Dann gilt $\frac{\partial}{\partial t} f(\phi_t(z)) \Big|_{t=t_0} = \frac{\partial}{\partial t} f(\phi_{t_0}(\phi_t(z))) \Big|_{t=0}$

$$= \{H, f(\phi_{t_0}(\cdot))\},$$

also $\frac{\partial}{\partial t} f_t = \{H, f_t\}.$

Gleichmassen $\frac{\partial}{\partial t} g_t = \{H, g_t\}$.

$$\begin{aligned} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \{f_t, g_t\} &= \left\{ \frac{\partial}{\partial t} f_t, g_t \right\} + \left\{ f_t, \frac{\partial}{\partial t} g_t \right\} \\ &= \{ \{H, f_t\}, g_t \} + \{ f_t, \{H, g_t\} \} \\ \text{Jacobi-} &\quad \Rightarrow \\ \text{Identität} &= \{H, \{f_t, g_t\}\}. \end{aligned}$$

• Aber auch $h_t(z) = \{f, g\}|_{\phi_t(z)}$ erfüllt die Differentialgleichung $h_0(z) = \{f, g\}|_z = \{f_0, g_0\}|_z$

$$\frac{\partial}{\partial t} h_t = \{H, h_t\}.$$

$$\Rightarrow \{f_t, g_t\} = h_t \quad \forall t, \text{ d.h. } \{f \circ \phi_t, g \circ \phi_t\} = \{f, g\} \circ \phi_t.$$

Da kanonische Transformationen volumenertreuend sind, bekommen wir:

Satz von Liouville: $\forall \Omega \subset \mathbb{R}^{2N}$ ist das Phasenraumvolumen

$|\phi_t(\Omega)|$ zeitunabhängig.

Anwendung: Wiederekehrsatz von Poincaré. (Hier nur eine einfache Version.)

Sei ϕ eine volumenertreuende invertierbare Abbildung auf einen beschränkten Gebiet $G \subset \mathbb{R}^k$ ($k \in \mathbb{N}$). Sei $z_0 \in G$ beliebig, und sei $U \subset G$ eine Umgebung von z_0 (z.B. $U = B_\varepsilon(z_0)$, $\varepsilon > 0$ klein).

Dann $\exists z \in U$ sodass $\phi^r(z) = \phi(\phi(\dots \phi(z) \dots)) \in U$ für ein $r \geq 1$.

Beweis.



Die Mengen $U, \phi(U), \phi^2(U), \dots$ haben alle dasselbe Volumen und liegen in G . Wären sie alle

disjunkt, so wäre $\text{vol}(G) \geq \sum_{j=0}^{m-1} \text{vol}(\phi^j(U)) = m \text{vol}(U)$

für alle m , also $\text{vol}(G) = \infty$ (da $\text{vol}(U) > 0$). Dies widerspricht der Beschränktheit von G .

$\Rightarrow \exists n < m$ sodass $\phi^n(U) \cap \phi^m(U) \neq \emptyset$; sei $z_1 \in \phi^n(U) \cap \phi^m(U)$.

Also ist $z_1 = \phi^n(z_0)$ für ein $z_0 \in U$, und

$$\phi_{=:r}^{m-n}(z_1) = \phi^{m-n}(\phi^n(z_0)) = \phi^m(z_0) \in U.$$

Stärkere Version: für fast alle $z \in U$ und $\forall n \exists m \geq n$ sodass $\phi^m(z) \in U$.

Beweis (für Interessierte).

- $\Omega(n) := \bigcup_{m \geq n} \phi^{-m}(U)$ ist die Menge aller Punkte $z \in G$, die zu einem Zeitpunkt $m \geq n$ in der Menge U landen (d.h. $\phi^m(z) \in U$)

- $W = \bigcap_{n=0}^{\infty} \Omega(n)$ ist die Menge der **Wiederkehrpunkte**: Punkte $z \in G$, die unendlich oft in U landen (d.h. $\exists n_1 < n_2 < \dots$ sodass $\phi^{n_j}(z) \in U \forall j$).

- Da $\Omega(0) \supset \Omega(1) \supset \Omega(2) \supset \dots \supset W$ und $\text{vol}(\Omega(n)) \leq \text{vol}(G) < \infty$, gilt $\text{vol}(W) = \text{vol}\left(\bigcap_{n=0}^{\infty} \Omega(n)\right) = \lim_{n \rightarrow \infty} \text{vol}(\Omega(n))$.

- Da aber für $n > n'$ gilt

$$\phi^{n-n'}(\Omega(n)) = \Omega(n')$$

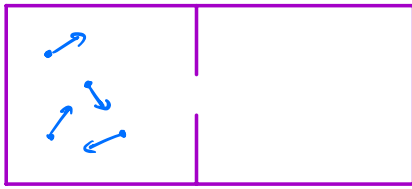
und ϕ volumenhaltend ist, ist $\text{vol}(\Omega(n)) = \text{vol}(\Omega(n'))$, also

$$\text{vol}(W) = \text{vol}(\Omega(0))$$

- Da $W \subset \Omega(0)$, ist also $\text{vol}(\Omega(0) \setminus W) = 0$.

- Da $U \subset \Omega(0)$, folgt $\text{vol}(U \setminus W) = 0$: fast alle $z \in U$ sind Wiederkehrpunkte. \square

Beispiel. Ausströmen eines Gases. Alle Teilchen sind anfänglich in der linken Kammer, mit endlicher Gesamtenergie E .



Hamilton-Funktion für $z = (\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_n)$

$$H(z) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + W(\vec{x}_i) \right) + \sum_{i < k} V(|\vec{x}_i - \vec{x}_k|).$$

V : paarweise Wechselwirkung,

W : Potential der Wand des Behälters ($\nearrow \infty$ am Rand).

(V und W seien nach unten beschränkt, etwa $V, W \geq 0$.)

- Das Gebiet $G = \{z \in \mathbb{R}^{2n} : H(z) \leq E\}$ ist dann
 - beschränkt: alle \vec{x}_i liegen in dem (endlich grossen) Behälter
alle \vec{p}_i sind durch $\sqrt{2mE}$ beschränkt.
- Nach dem Wiedkehrsatz, angewendet auf $\phi = \phi_1$ (Zeitentwicklung um 1 Zeitschritt) sind also für fast alle Anfangsbedingungen $z(0)$ die Teilchen zu einem späteren Zeitpunkt wieder fast genau am Ursprungsort mit ihren ursprünglichen Geschwindigkeiten (und kehren immer wieder dorthin zurück!).

Der obige Satz, dass das Vektorfeld X_F (für eine beliebige Observable $F = F(q, p)$) einen kanonischen Fluss erzeugt, hat eine Umkehrung:

Satz: Sei $\{\phi_\lambda\}_{\lambda \in \mathbb{R}}$ ein kanonischer Fluss. Dann $\exists F = F(q, p)$, sodass das erzeugende Vektorfeld von $\{\phi_\lambda\}$ gerade X_F ist. (Voraussetzung: das Gebiet, auf dem $\{\phi_\lambda\}$ definiert ist, ist einfach zusammenhängend.)

Beweis: Das erzeugende Vektorfeld von $\{\phi_\lambda\}$ ist definiert als

$$v^j(z) = \left. \frac{\partial \phi_\lambda^j}{\partial \lambda}(z) \right|_{\lambda=0}.$$

- Da ϕ_λ eine kanonische Transformation ist, ist die Jacobi-Matrix von ϕ_λ symplektisch:

$$A_\lambda \varepsilon A_\lambda^T = \varepsilon \quad \forall \lambda, \text{ wobei } A_\lambda(z) = \left(\frac{\partial \phi_\lambda^i}{\partial z^j}(z) \right)_{ij}.$$

- Wir leiten dies nach λ ab und setzen $\lambda=0$; da $\phi_0^i(z) = z^i$, ergibt dies mit $V = \left(\frac{\partial v^i}{\partial z^j} \right)_{ij}$:

$$V \varepsilon + \varepsilon V^T = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \varepsilon V = (\varepsilon V)^T$$

$\varepsilon^T = \varepsilon^{-1} = -\varepsilon$

Die (i,k) -Komponente dieser Gleichung ist

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial z^k} \sum_{j=1}^{2N} \varepsilon_{ij} v^j}_{= g_i(z)} = \frac{\partial}{\partial z^i} \underbrace{\sum_{l=1}^{2N} \varepsilon_{kl} v^l}_{= g_k(z)} \quad \textcircled{*}$$

- $\textcircled{*}$ impliziert (wenn das Gebiet des Phasenraums in dem $\{\phi_\lambda\}$ definiert ist, einfach zusammenhängend ist)

$$\exists F, \text{ sodass } g_i = \frac{\partial F}{\partial z^i} = \sum_j \varepsilon_{ij} v^j$$

$$\Leftrightarrow v^i = - \sum_k \varepsilon_{ik} \frac{\partial F}{\partial z^k} = \sum_k \frac{\partial F}{\partial z^k} \varepsilon_{ki}$$

$$\Leftrightarrow v = X_F.$$

6.3.2. Erhaltungsgrößen

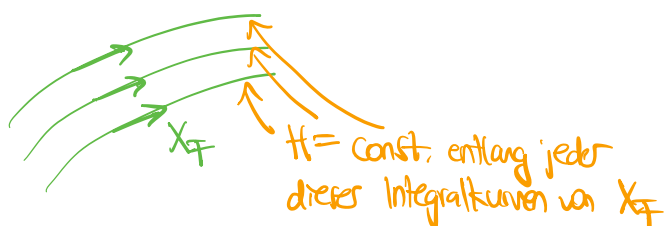
Wir betrachten ein System mit Hamiltonfunktion $H = H(q, p)$.

- Angenommen, $F = F(q, p)$ ist eine Erhaltungsgröße. Dann ist

$$0 = \frac{dF}{dt} = \{H, F\} = -\{F, H\} = -X_F H.$$

D.h., H ist unter dem von X_F erzeugten Fluss $\{\phi_\lambda^{X_F}\}_{\lambda \in \mathbb{R}}$ invariant.

(In der Tat ist $\frac{d}{d\lambda} H(\phi_\lambda^{X_F}(z)) \Big|_{\lambda=\lambda_0} = X_F|_{\phi_{\lambda_0}^{X_F}(z)}(H) = 0 \forall \lambda_0$.)



- Umgekehrt: ist H invariant unter einem kanonischen Fluss $\{\phi_\lambda\}_{\lambda \in \mathbb{R}}$, so bekommen wir eine Erhaltungsgröße $F = F(q, p)$ infolge des letzten Satzes im vorigen Abschnitt.

Beispiel. Phasenraum \mathbb{R}^6 , Koordinaten (\vec{q}, \vec{p}) . Betrachten, für $\vec{e} \in \mathbb{R}^3, |\vec{e}|=1$:

$$F(\vec{q}, \vec{p}) = (\vec{q} \times \vec{p}) \cdot \vec{e} \quad (= (\vec{p} \times \vec{e}) \cdot \vec{q} = (\vec{e} \times \vec{q}) \cdot \vec{p})$$

Der durch $X_F = (\vec{p} \times \vec{e}) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} - (\vec{e} \times \vec{q}) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{q}}$ erzeugte kanonische Fluss im Phasenraum ist

$$\begin{cases} \frac{d\vec{q}_\lambda}{d\lambda} = -\vec{e} \times \vec{q}_\lambda, & \vec{q}_0 = \vec{q}, \\ \frac{d\vec{p}_\lambda}{d\lambda} = -\vec{e} \times \vec{p}_\lambda, & \vec{p}_0 = \vec{p}. \end{cases}$$

Rotation um \vec{e} -Achse um $-\lambda$

$$\text{Also } \phi_\lambda(\vec{q}, \vec{p}) = (\vec{q}_\lambda, \vec{p}_\lambda) = (R_{\vec{e}}(-\lambda)\vec{q}, R_{\vec{e}}(-\lambda)\vec{p}).$$

Für ein mechanisches System mit Hamiltonfunktion $H(\vec{q}, \vec{p})$ ist dann

$$\frac{d}{dt} F = \{H, F\} = -X_F H = \frac{d}{d\lambda} H(R_{\vec{e}}(\lambda)\vec{q}, R_{\vec{e}}(\lambda)\vec{p})|_{\lambda=0}.$$

=: Komponente des Drehmoments in \vec{e} -Richtung: $\vec{e} \cdot \vec{M}$

(Hierbei ist wie üblich (\vec{q}, \vec{p}) eine Lösung der Hamiltongleichungen

$$\dot{\vec{q}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}, \quad \dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{q}}.)$$

$\Rightarrow F = \vec{e} \cdot (\vec{q} \times \vec{p})$ ist erhalten genau dann, wenn H invariant ist unter allen Rotationen $(\vec{q}, \vec{p}) \mapsto (R_{\vec{e}}(\lambda)\vec{q}, R_{\vec{e}}(\lambda)\vec{p})$ um die \vec{e} -Achse.