1781-1840

2.2 Poisson-Klammern, kanonische Transformationen

Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen, $\dot{q}_a = \frac{\partial H}{\partial p_a}$, $\dot{p}_a = -\frac{\partial H}{\partial q_a}$, sind nicht symmetrisch unter Vertauschung von q und p. Dieser „Schönheitsfehler" kann durch die Einführung von Poisson-Klammern versteckt werden.

Sei $f(q,p,t)$ eine beliebige im Phasenraum definierte Funktion. Es gilt:

$$\frac{df}{dt} = \sum_a \frac{\partial f}{\partial q_a}\dot{q}_a + \sum_a \frac{\partial f}{\partial p_a}\dot{p}_a + \frac{\partial f}{\partial t}$$

$$= \sum_a \left\{ \frac{\partial f}{\partial q_a}\frac{\partial H}{\partial p_a} - \frac{\partial f}{\partial p_a}\frac{\partial H}{\partial q_a} \right\} + \frac{\partial f}{\partial t} .$$

Definition: Für zwei reellwertige Funktionen $f(q,p,t)$, $g(q,p,t)$ wird die Poisson-Klammer definiert als

$$\{f,g\} := \sum_a \left\{ \frac{\partial f}{\partial q_a}\frac{\partial g}{\partial p_a} - \frac{\partial f}{\partial p_a}\frac{\partial g}{\partial q_a} \right\} .$$

Folgen:

* Von oben: $\frac{df}{dt} = \{f,H\} + \frac{\partial f}{\partial t}$.
* $\{q_a,H\} = \sum_b \left\{ \underbrace{\frac{\partial q_a}{\partial q_b}}_{\delta_{ab}}\frac{\partial H}{\partial p_b} - \underbrace{\frac{\partial q_a}{\partial p_b}}_{0}\frac{\partial H}{\partial q_b} \right\} = \frac{\partial H}{\partial p_a} \Rightarrow \boxed{\dot{q}_a = \{q_a,H\}}$
* $\{p_a,H\} = \sum_b \left\{ \underbrace{\frac{\partial p_a}{\partial q_b}}_{0}\frac{\partial H}{\partial p_b} - \underbrace{\frac{\partial p_a}{\partial p_b}}_{\delta_{ab}}\frac{\partial H}{\partial q_b} \right\} = -\frac{\partial H}{\partial q_a} \Rightarrow \boxed{\dot{p}_a = \{p_a,H\}}$

Eigenschaften:

(i) antisymmetrisch: $\{g,f\} = \sum_a \left\{ \frac{\partial g}{\partial q_a}\frac{\partial f}{\partial p_a} - \frac{\partial g}{\partial p_a}\frac{\partial f}{\partial q_a} \right\} = -\{f,g\}$.

(ii) für eine Konstante c: $\{c,f\} = 0$.

(iii) bilinear: $\{a_1 f_1 + a_2 f_2, g\} = a_1\{f_1,g\} + a_2\{f_2,g\}$.

1804-1851

(iv) „Jacobi-Identität": $\{f,\{g,h\}\} + \{g,\{h,f\}\} + \{h,\{f,g\}\} = 0$.

Der Beweis ist mühsam aber geradlinig:

$$\{g,h\} = \sum_a \frac{\partial g}{\partial q_a}\frac{\partial h}{\partial p_a} - \frac{\partial g}{\partial p_a}\frac{\partial h}{\partial q_a}$$

$$\{f,\{g,h\}\} = \sum_{a,b} \frac{\partial f}{\partial q_b}\left[\frac{\partial^2 g}{\partial q_a \partial p_b}\frac{\partial h}{\partial p_a} + \frac{\partial g}{\partial q_a}\frac{\partial^2 h}{\partial p_a \partial p_b} - \frac{\partial^2 g}{\partial p_a \partial p_b}\frac{\partial h}{\partial q_a} - \frac{\partial g}{\partial p_a}\frac{\partial^2 h}{\partial q_a \partial p_b} \right]$$

$$- \frac{\partial f}{\partial p_b}\left[\frac{\partial^2 g}{\partial q_a \partial q_b}\frac{\partial h}{\partial p_a} + \frac{\partial g}{\partial q_a}\frac{\partial^2 h}{\partial p_a \partial q_b} - \frac{\partial^2 g}{\partial p_a \partial q_b}\frac{\partial h}{\partial q_a} - \frac{\partial g}{\partial p_a}\frac{\partial^2 h}{\partial q_a \partial q_b} \right]$$

Addiere die weiteren Terme und umnenne gegebenenfalls Indizes $\Rightarrow$ $\square$.

(v) auch wahr: $\{fg,h\} = f\{g,h\} + \{f,h\}g$ (aus Produktregel).

Spezialfälle:

$$* \quad \{q_a, q_b\} = \{p_a, p_b\} = 0 \,, \qquad \text{denn } \frac{\partial q_b}{\partial p_a} = \frac{\partial p_b}{\partial q_a} = 0 .$$

$$* \quad \{q_a, p_b\} = \sum_c \Big\{ \underbrace{\frac{\partial q_a}{\partial q_c}}_{\delta_{ac}} \underbrace{\frac{\partial p_b}{\partial p_c}}_{\delta_{bc}} - \underbrace{\frac{\partial q_a}{\partial p_c}}_{0} \underbrace{\frac{\partial p_b}{\partial q_c}}_{0} \Big\}$$

$$= \sum_c \delta_{ac}\delta_{bc} = \delta_{ab} .$$

Diese Beziehungen finden direkte „Partner" in den Grundgleichungen der Quantenmechanik.

———— ° ———— ° ———— ° ————

Kanonische Transformationen

Seite 27: Punkttransformation: $q_a = q_a(\bar{q}, t)$. Bezeichne jetzt $Q_a := \bar{q}_a$. Sei P_a kanonisch konjugiert zu Q_a. Die Transformation $Q_a = Q_a(q,p,t)$, $P_a = P_a(q,p,t)$ sei „Punkttransformation im Phasenraum". Falls die neuen Koordinaten wieder „kanonisch" sind, d.h. die Werte von Poisson-Klammern unverändert bleiben,

$$\{f,g\}_{qp} = \{f,g\}_{QP} \,, \quad \{Q_a, Q_b\} = \{P_a, P_b\} = 0 \,, \quad \{Q_a, P_b\} = \delta_{ab} \,,$$

sprechen wir von einer „kanonischen Transformation".

Unter welchen Bedingungen ist dies der Fall?

Beispiel: eindimensionaler Fall $(s=1)$

$$\{f,g\}_{qp} = \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial g}{\partial q}$$

$$= \left(\frac{\partial f}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial q} + \frac{\partial f}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial q}\right)\left(\frac{\partial g}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial p} + \frac{\partial g}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial p}\right)$$

$$- \left(\frac{\partial f}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial p} + \frac{\partial f}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial p}\right)\left(\frac{\partial g}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial q} + \frac{\partial g}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial q}\right)$$

$$= \frac{\partial f}{\partial Q}\frac{\partial g}{\partial Q}\left(\cancel{\frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial Q}{\partial p}} - \cancel{\frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial Q}{\partial q}}\right)$$

$$+ \frac{\partial f}{\partial Q}\frac{\partial g}{\partial P}\left(\frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p} - \frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial P}{\partial q}\right)$$

$$+ \frac{\partial f}{\partial P}\frac{\partial g}{\partial Q}\left(\frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial Q}{\partial p} - \frac{\partial P}{\partial p}\frac{\partial Q}{\partial q}\right)$$

$$+ \frac{\partial f}{\partial P}\frac{\partial g}{\partial P}\left(\cancel{\frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p}} - \cancel{\frac{\partial P}{\partial p}\frac{\partial P}{\partial q}}\right)$$

$$= \left(\frac{\partial f}{\partial Q}\frac{\partial g}{\partial P} - \frac{\partial f}{\partial P}\frac{\partial g}{\partial Q}\right)\left(\frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p} - \frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial P}{\partial q}\right)$$

$$= \{f,g\}_{QP}\,\{Q,P\}_{qp} .$$

Es muss also $\{Q,P\}_{qp} = \det\begin{pmatrix} \frac{\partial Q}{\partial q} & \frac{\partial Q}{\partial p} \\ \frac{\partial P}{\partial q} & \frac{\partial P}{\partial p} \end{pmatrix} = 1$ gelten!

Um konkreter zu sein betrachten wir eine lineare Transformation:

$$\begin{cases} Q = a_{11} q + a_{12} p + b_1 \\ P = a_{21} q + a_{22} p + b_2 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad \{Q,P\}_{qp} = \det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \overset{!}{=} 1 \,.$$

D.h., die Matrix $A = (a_{ij})$ muss „unimodular" sein.
Eine Möglichkeit ist eine Drehung, $A = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix}$;
eine andere eine „Skalentransformation", $A = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & 1/\lambda \end{pmatrix}$.

<u>Allgemeiner Fall:</u>

$$\{f,g\}_{qp} = \sum_a \left\{ \frac{\partial f}{\partial q_a} \frac{\partial g}{\partial p_a} - \frac{\partial f}{\partial p_a} \frac{\partial g}{\partial q_a} \right\}$$

$$= \left(\left\{ \frac{\partial f}{\partial q_a} \right\}, \left\{ \frac{\partial f}{\partial p_a} \right\} \right) \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1}_{s\times s} \\ -\mathbb{1}_{s\times s} & 0 \end{pmatrix}}_{2s\times 2s\text{-Matrix} =: J} \begin{pmatrix} \left\{ \frac{\partial g}{\partial q_a} \right\} \\ \left\{ \frac{\partial g}{\partial p_a} \right\} \end{pmatrix}$$

Auf der anderen Seite können wir die Kettenregel benutzen:

$$\frac{\partial g}{\partial q_a} = \sum_b \left\{ \frac{\partial Q_b}{\partial q_a} \frac{\partial g}{\partial Q_b} + \frac{\partial P_b}{\partial q_a} \frac{\partial g}{\partial P_b} \right\}$$

$$\frac{\partial g}{\partial p_a} = \sum_b \left\{ \frac{\partial Q_b}{\partial p_a} \frac{\partial g}{\partial Q_b} + \frac{\partial P_b}{\partial p_a} \frac{\partial g}{\partial P_b} \right\}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \left\{ \frac{\partial g}{\partial q_a} \right\} \\ \left\{ \frac{\partial g}{\partial p_a} \right\} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial Q_b}{\partial q_a} & \frac{\partial P_b}{\partial q_a} \\ \frac{\partial Q_b}{\partial p_a} & \frac{\partial P_b}{\partial p_a} \end{pmatrix}}_{2s\times 2s\text{-Matrix} =: M} \begin{pmatrix} \left\{ \frac{\partial g}{\partial Q_b} \right\} \\ \left\{ \frac{\partial g}{\partial P_b} \right\} \end{pmatrix} .$$

Die Bedingung $\{f,g\}_{qp} = \{f,g\}_{QP}$ wird zum

$$\boxed{M^T J M = J} \,.$$

Solche Matrizen bilden eine „symplektische Gruppe", bezeichnet mit $Sp(2s)$. Diese Gruppe bildet die Grundlage für die „Mathematik der klassischen Mechanik", vgl. z.B. V. Arnold, „Mathematische Methoden der klassischen Mechanik".

Bemerkungen: (i) Die Zeitentwicklung eines Systems kann als eine kanonische Transformation betrachtet werden.

$$\begin{cases} Q_a := q_a(q_0, p_0, t) \\ P_a := p_a(q_0, p_0, t) \end{cases}$$

Anfangsbedingungen

Denn (infinitesimal):

$$Q_b = q_b + \Delta t \frac{dq_b}{dt} = q_b + \Delta t \frac{\partial H}{\partial p_b}$$
$$P_b = p_b + \Delta t \frac{dp_b}{dt} = p_b - \Delta t \frac{\partial H}{\partial q_b}$$

$$\Rightarrow M = \begin{pmatrix} \delta_{ab} + \Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial q_a \partial p_b} & -\Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial q_a \partial q_b} \\ \Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial p_a \partial p_b} & \delta_{ab} - \Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial p_a \partial q_b} \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \mathbb{1} + \Delta t A & -\Delta t B \\ \Delta t C & \mathbb{1} - \Delta t A^T \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow JM = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ -\mathbb{1} & 0 \end{pmatrix} M = \begin{pmatrix} \Delta t C & \mathbb{1} - \Delta t A^T \\ -\mathbb{1} - \Delta t A & \Delta t B \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow M^T J M = \begin{pmatrix} \mathbb{1} + \Delta t A^T & \Delta t C \\ -\Delta t B & \mathbb{1} - \Delta t A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta t C & \mathbb{1} - \Delta t A^T \\ -\mathbb{1} - \Delta t A & \Delta t B \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ -\mathbb{1} & 0 \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\Delta t^2) = J \quad \Rightarrow \square .$$

(ii) Interessante Aufgabe: Unter welchen Bedingungen kann eine kanonische Transformation gefunden werden, so dass alle Q_a zyklisch sind?

Dann ist nämlich $H = H(P_a, t)$; $\dot{P}_a = 0$; und $\dot{Q}_a = \frac{\partial H}{\partial P_a}$ = eine gegebene Funktion von t.

Solche Systeme werden „integrierbar" genannt.

(iii) Aus $M^T J M = J$ folgt $|\det M| = 1$. Daher gilt

$$\int dQ_1 \dots dQ_s dP_1 \dots dP_s = \int dq_1 \dots dq_s dp_1 \dots dp_s \underbrace{\left| \det \frac{\partial(Q,P)}{\partial(q,p)} \right|}_{1} .$$

In anderen Worten, das Volumenelement im Phasenraum ist eine kanonische Invariante. Dies spielt in der statistischen Mechanik und auch im Kapitel 2.3 eine wichtige Rolle.

— ∘ —