

EBERHARD KARLS  
UNIVERSITÄT  
TÜBINGEN



Prof. Dr. Nils Schopohl

Institut für Theoretische Physik Tübingen  
[nils.schopohl@uni-tuebingen.de](mailto:nils.schopohl@uni-tuebingen.de)

# Skript zur Vorlesung Integrierter Kurs, Physik III Analytische Mechanik

Wintersemester 2006/2007

Gesetzt von  
[Burkhard U.W. Schwab](#)  
Markus Klein  
Dino Rezes



# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Phasenraum und Phasenraumportraits</b>	<b>1</b>
1.1 Einleitung . . . . .	1
1.2 Dynamik von Massepunkten, Verallgemeinerte Koordinaten und Impulse . . . . .	3
1.2.1 Freies Teilchen . . . . .	4
1.2.2 Portrait des Harmonischen Oszillators im Phasenraum . . . . .	5
1.2.3 Abstoßende elastische Kraft . . . . .	6
1.2.4 Phasenraumportrait eines Systems in $D=1$ Dimensionen mit „W-Potential“ . . . . .	7
1.2.5 Phasenraumportrait eines Systems mit periodischer Kraft . . . . .	8
1.3 Periode eines nichtlinearen Oszillators . . . . .	9
1.4 Zeitliche Evolution im Phasenraum . . . . .	10
1.4.1 Beispiel - Freier Fall . . . . .	14
1.4.2 Beispiel - Reflektion an einer Wand . . . . .	15
1.4.3 Beispiel - Harmonischer Oszillator . . . . .	15
1.4.4 Allgemeine konservative Kraft . . . . .	17
1.5 Zyklische Variable und periodischer Orbit . . . . .	18
<b>2 Charakteristische Funktion von Hamilton</b>	<b>20</b>
2.1 Wirkungsintegral in $D=1$ räumlichen Dimensionen . . . . .	20
2.2 Wirkungsintegral in $D=3$ räumlichen Dimensionen . . . . .	22
2.3 Beispiel - Wurfparabel . . . . .	23
2.4 Rekonstruktion von Trajektorien aus Flächen konstanter Wirkung . . . . .	25
<b>3 Prinzip von Euler-Maupertius</b>	<b>27</b>
3.1 Isoenergetische Variationen . . . . .	27
3.2 Bestimmung der physikalischen Bahnkurve aus einem Variationsprinzip . . . . .	30
3.2.1 Brachistochronen Problem . . . . .	33
3.2.2 Zykloide . . . . .	36
3.2.3 Tautochrone . . . . .	38
<b>4 Lagrange-Formalismus</b>	<b>40</b>
4.1 Vorbemerkungen . . . . .	40
4.2 Zwangsbedingungen und Prinzip von d'Alembert . . . . .	40
4.3 Lagrangefunktion und Bewegungsgleichungen . . . . .	44
4.4 Invarianz der Lagrange-Bewegungsgleichungen unter Koordinatentransformationen . . . . .	49
4.5 Nichteindeutigkeit der Lagrangefunktion . . . . .	50
4.6 Geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld . . . . .	52
4.6.1 Elektromagnetische Einheiten . . . . .	55
4.7 Lagrange-Multiplikatoren und Zwangskräfte . . . . .	56

4.8	Zusammenfassung	61
<b>5</b>	<b>Hamilton-Formalismus und Kanonische Transformationen</b>	<b>62</b>
5.1	Vorbemerkungen	62
5.2	Hamiltonfunktion und Hamilton'sche Bewegungsgleichungen	63
5.3	Erweiterter Phasenraum	65
5.3.1	Beispiel - Bewegung im konstanten Magnetfeld	67
5.4	Poissonklammern	68
5.4.1	Beispiel - Freier Fall	72
5.4.2	Algebraische Rechenregeln für Poissonklammern	73
5.4.3	Drehimpuls	76
5.5	Kanonische Transformationen	77
5.5.1	Symplektische Struktur und Kanonische Transformationen	81
5.6	Beispiele für Kanonische Transformationen	85
5.6.1	Beispiel: Kepler Problem	95
5.6.2	Eichtransformation	96
5.6.3	Differentialgleichung von Hamilton-Jacobi	97
5.7	Invarianz des Phasenraumvolumens unter kanonischen Transformationen	98
5.8	Liouville-Gleichung	99
5.8.1	Hamiltonfunktion für gedämpften Harmonischen Oszillator	101
5.9	Wiederkehrsatz von Poincaré	102
5.10	Langzeitprognosen in der Himmelsmechanik	103
<b>6</b>	<b>Prinzip der stationären Wirkung und Noethertheorem</b>	<b>106</b>
6.1	Einleitung	106
6.2	Prinzip der Stationären Wirkung	106
6.3	Variationsprinzip für Hamiltonsche Bewegungsgleichungen	111
6.4	Kanonische Transformationen und ihre Erzeugenden	114
6.5	Noethersches Theorem	117
6.5.1	Energieerhaltung	119
6.5.2	Impulserhaltung	119
6.5.3	Drehimpulserhaltung	119
6.5.4	System mit helikaler Symmetrie	120
6.5.5	Wronskideterminante	121
6.5.6	Galilei-Transformation	122
<b>7</b>	<b>Theorie der kleinen Schwingungen</b>	<b>125</b>
7.1	Einleitung	125
7.2	Virialsatz	125
7.3	Kleine Schwingungen	128
7.4	Einfluss äußerer Kräfte	131
7.5	Beispiel - Streckschwingungen eines linearen Moleküls	132
7.6	Gedämpfter harmonischer Oszillator	134
7.7	Gedämpfter harmonischer Oszillator mit Antrieb: Resonanz	135
<b>8</b>	<b>Kontinuumsmechanik</b>	<b>139</b>
8.1	Einleitung	139
8.2	Kontinuumsmechanik	139
8.3	Lagrange-Formalismus für Felder	143
8.4	Elastisches Medium in harmonischer Näherung	144

8.4.1	Wellengleichung in $D=1$ Dimensionen . . . . .	145
8.4.2	Geteilte Saite mit unstetiger Massebelegung . . . . .	149
8.4.3	Ausbreitung elastischer Wellen im dreifach geschichteten Medium . . . . .	151
8.4.4	Perfekte Transmission in dünner Schicht . . . . .	156
8.5	Zweidimensionale Wellengleichung: Schwingungsmoden der rechteckigen Membran	157
<b>A</b>	<b>Interessantes zu bedeutenden Physikern/Mathematikern</b>	<b>I</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>III</b>

# Kapitel 1

## Phasenraum und Phasenraumportraits

### 1.1 Einleitung

Isaac Newton (1643-1727) entwickelte im 17. Jahrhundert eine außerordentlich erfolgreiche Theorie der Bewegung massiver Körper. Diese Theorie beruht auf dem Grundbegriff des Massepunktes. Ein Massepunkt ist ein Teilchen ohne innere Struktur und Ausdehnung, dem eine Masse  $m$ , eine Flugbahn  $\mathbf{r}(t)$ , sowie ein Impuls  $\mathbf{p}(t) = m \frac{d}{dt} \mathbf{r}(t)$  zu einem Zeitpunkt  $t$  zugeordnet sind. Oft können Körper mit endlicher Ausdehnung (z.B. Planeten) als Massenpunkte idealisiert werden, wenn die Ausdehnung des Körpers im Vergleich zu den Abmessungen der geometrischen Bahndaten des Körpers als klein angesehen werden dürfen. Ausgehend von vorgegebenen Anfangswerten  $\mathbf{r}(t = t_0)$  und  $\mathbf{p}(t = t_0)$  zur Anfangszeit  $t = t_0$  wird die Flugbahn  $\mathbf{r}(t)$  des Massepunktes als Lösung der Newton'schen Bewegungsgleichung berechnet:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{p}(t) = \mathbf{F}$$

Die auf den Massepunkt wirkende Kraft  $\mathbf{F}$  ist i.a. eine Funktion der Zeit  $t$ , der Position  $\mathbf{r}(t)$  und der Geschwindigkeit  $\frac{d}{dt} \mathbf{r}(t)$  des Massepunktes.

Die Bewegung mehrerer Massenpunkte wird durch Angabe der individuellen Flugbahn  $\mathbf{r}^{(j)}(t)$  jedes einzelnen Massepunktes  $m_j$  beschrieben, wobei der Index  $j = 1, 2, \dots, N$  die Massenpunkte unterscheidet und zählt. Die Kraft  $\mathbf{F}^{(j)}$ , die auf das  $j$ -te Teilchen einwirkt, kann z.B. von der Position  $\mathbf{r}^{(k)}(t)$  und der Geschwindigkeit  $\frac{d}{dt} \mathbf{r}^{(k)}(t)$  der übrigen  $N - 1$  Teilchen abhängen. Diese Eigenschaft bezeichnet man als Wechselwirkung. Da Teilchen nicht mit sich selbst wechselwirken, gilt  $k \neq j$ , wobei  $1 \leq k \leq N$ .

Die Aufgabe, aus gegebener Kraft  $\mathbf{F}^{(j)}$  und gegebenen Anfangswerten  $\mathbf{r}^{(j)}(t = t_0)$  und  $\mathbf{p}^{(j)}(t = t_0)$  die Flugbahn von Massenpunkten zu bestimmen, bezeichnet man als **Kinematik**. Die Kinematik selbst ist aber nur eine Vorstufe zur Erforschung der Natur der auf die Massenpunkte einwirkenden Kräfte. So geben die Kepler'schen Gesetze eine rein kinematische Beschreibung der Planetenbewegung, während Newton die Ursache der Bewegung der Planeten aus seinem universellen Gravitationsgesetz ableiten konnte. Für  $N = 2$  Massenpunkte  $m_1$  (Erde) und  $m_2$  (Sonne) spürt z.B. die Erde eine Anziehungskraft, die entlang der Richtung  $\hat{\mathbf{e}}^{(1,2)}$  der geraden Verbindungslinie zwischen den Massenpunkten orientiert ist:

$$\mathbf{F}^{(1)} = -G \frac{m_1 m_2}{|\mathbf{r}^{(1)}(t) - \mathbf{r}^{(2)}(t)|^2} \hat{\mathbf{e}}^{(1,2)}.$$

In der **Dynamik** geht es vor allem darum, ein geeignetes Modell für die wirkende Kraft  $\mathbf{F}^{(j)}$  zu finden und zu begründen, welches als Ursache für die Beschleunigung von Massenpunkten gelten kann.

Ausgedehnte massive Körper werden also aus einer (genügend großen) Anzahl  $N$  von individuellen Punktmassen zusammengesetzt angesehen, wobei z.B. die Erhaltung der äußeren geometrischen Gestalt des Körpers mittels Nebenbedingungen an die Koordinaten der individuellen Massenpunkte aufrechterhalten wird. In dem Fall können die Massenpunkte, aus denen der Körper zusammengesetzt ist, nicht alle möglichen Positionen einnehmen, sondern nur diejenigen, die mit den Nebenbedingungen kompatibel sind.

Das derart aufgebaute theoretische Gebäude zur Beschreibung der Bewegung individueller Massenpunkte unter dem Einfluss von Kräften nennen wir heute die "*Klassische Mechanik*".

Hat man eine Anzahl  $N$  von Teilchen in einem Kasten mit starren Wänden, so scheint es möglich, die Bewegung der Teilchen für jeden zukünftigen (oder vergangenen) Zeitpunkt vorherzusagen. Man braucht nur zu einem bestimmten Zeitpunkt die Position  $\mathbf{r}^{(j)}(t = t_0)$  und Geschwindigkeit  $\frac{d}{dt}\mathbf{r}^{(j)}(t = t_0)$  jedes Teilchens im Kasten zu einem Anfangszeitpunkt  $t = t_0$  zu messen. Vorausgesetzt diese Messungen werden mit entsprechender Genauigkeit durchgeführt, ist die Vorhersage der zeitlichen Entwicklung der Teilchen im Kasten im Prinzip mit jeder gewünschten Genauigkeit erreichbar. Diese kinematische Vorstellung begründete das in der Physik des 18. und 19. Jahrhunderts vorherrschende **Paradigma** der *deterministischen* Naturbeschreibung. Der Glaube an den Determinismus beruhte nicht zuletzt auf dem überwältigenden Erfolg bei den Anwendungen der Mechanik auf Probleme der Astronomie (Himmelsmechanik) und der Technik (Schiffbau, Bauwesen, Artillerie). Eine ganz wesentliche Eigenschaft der Mechanik, die zu ihrer großen Akzeptanz bei allen Wissenschaftlern führte, ist ihre Anschaulichkeit. So kann z.B. jeder *sehen*, wie der Zusammenstoß zweier Billardkugeln erfolgt. Umgekehrt lässt sich die Anschauung überprüfen, indem der genaue Bahnverlauf mit den Gesetzen der Mechanik berechnet wird.

Heute wissen wir, dass dem Determinismus der "*Klassischen Mechanik*" Grenzen prinzipieller Art gesetzt sind. So ist die Langzeitprognose der zeitlichen Entwicklung eines nicht integrablen mechanischen Systems problematisch, da z.B. eine noch so kleine Störung der Anfangsdaten im Lauf der Zeit exponentiell verstärkt werden kann. Dieser Umstand hat dazu geführt, dass die "*Klassische Mechanik*" inzwischen durch die "*Chaostheorie*" und die "*Nichtlineare Dynamik*" ergänzt wurde.

Es ist sehr nützlich, die zeitliche Entwicklung einer Anzahl  $N$  individueller Massenpunkte, aus denen ein mechanisches System zusammengesetzt sei, als Bewegung eines Punktes

$$\Gamma(t) = (q(t), p(t)) = (q_1, \dots, q_{3N}; p_1, \dots, p_{3N})$$

in einem hochdimensionalen Raum, dem  $6N$ -dimensionalen **Phasenraum** aufzufassen. Für  $N$  Teilchen nummerieren wir z.B. die kartesischen Koordinaten des ersten Teilchens als  $q_1, q_2, q_3$ , die des zweiten Teilchens als  $q_4, q_5, q_6$  und schließlich die Koordinaten des  $N$ -ten Teilchens als  $q_{3N-2}, q_{3N-1}, q_{3N}$ , wobei  $j = 1, \dots, 3N$  und  $N$  die Anzahl der Teilchen in  $D = 3$  räumlichen Dimensionen ist. Entsprechend verfahren wir mit den Impulsen der Teilchen. Ähnlich wie in der vierdimensionalen Raum-Zeit der Speziellen Relativitätstheorie, in der Punkte der Raum-Zeit als Ereignisse bezeichnet werden, nennt man die Punkte eines Phasenraumes auch **Zustände** eines mechanischen Systems. Die im Verlauf der zeitlichen Evolution des Systems entstehenden Zustände  $\Gamma(t)$  die von einem Anfangszustand  $\Gamma(t = t_0)$  an ausgehen, nennt man **Trajektorie**. Äußerst interessant für uns ist die zeitliche Entwicklung eines Ensembles von Zuständen  $\Gamma(t = t_0)$ , die zu einem Anfangszeitpunkt  $t = t_0$  ein Gebiet  $\Omega(t = t_0)$  im Phasenraum mit Volumen  $|\Omega(t = t_0)|$  einnehmen, sozusagen eine „Wolke“ von Anfangszuständen. Jeder solche

Zustand  $\Gamma(t = t_0)$  aus der ursprünglichen Anfangswolke  $\Omega(t = t_0)$  wird durch die Hamilton'sche Dynamik auf einen Zustand  $\Gamma(t = t_1)$  zur späteren Zeit  $t = t_1$  abgebildet. Die Gesamtheit dieser Zustände  $\Gamma(t = t_1)$  bildet ein Gebiet  $\Omega(t = t_1)$ , welches das Bild der ursprünglichen Wolke von Anfangszuständen  $\Omega(t = t_0)$  ist. Die geometrische Gestalt des Gebietes  $\Omega(t = t_1)$  kann erheblich von derjenigen von  $\Omega(t = t_0)$  abweichen. Der **Satz von Liouville** spielt dabei eine große Rolle. Er besagt, dass bei Hamilton'schen Systemen im Lauf der zeitlichen Evolution das Volumen solcher Gebiete im Phasenraum konstant bleibt, also  $|\Omega(t = t_0)| = |\Omega(t = t_1)|$  für beliebige spätere Zeitpunkte  $t_1 > t_0$ . Die Gesamtheit aller Zustände  $\Gamma(t)$  im Phasenraum zu einem Zeitpunkt  $t$  kann man sich als Momentaufnahme der Teilchen in einer strömenden Flüssigkeit vorstellen. Der Satz von Liouville besagt dann, daß diese 'Phasenraum-Flüssigkeit' inkompressibel ist.

Der Satz von Liouville besagt auch, dass die *Dichte* von Teilchen im Ortsraum nur dann erhöht werden kann, wenn man gleichzeitig die *Dichte* im Impulsraum verringert, und umgekehrt. Diese „Unschärfe-Relation“ betrifft aber lediglich die Dichte im Phasenraum, aber nicht die Position und den Impuls individueller Teilchen, worin ein wichtiger Unterschied zur Quantenmechanik besteht.

Das Konzept des Phasenraums liefert die Möglichkeit, die zeitliche Entwicklung von dynamischen Systemen in einem Phasenraumportrait zu veranschaulichen, ohne dafür die Lösungsfunktionen explizit berechnen zu müssen. Man kann so qualitative Aussagen über Systeme mit analytisch nicht lösbarer Differentialgleichungen bzw. chaotische Systeme machen.

## 1.2 Dynamik von Massepunkten, Verallgemeinerte Koordinaten und Impulse

Die Dynamik einer Anzahl  $N$  von Massepunkten  $m_j$ <sup>1</sup> ist im Allgemeinen durch die Newton'schen Bewegungsgleichungen

$$m\ddot{q}_j(t) = F_j(q, \dot{q}, t)$$

gegeben. Hier ist

$$\dot{q}_j(t) = \frac{d}{dt}q_j(t)$$

die zeitliche Ableitung der Koordinate  $q_j(t)$ .

Oft ist es zweckmäßig, die  $3N$  Newton'schen Differentialgleichungen zweiter Ordnung als System von  $6N$  DGL'en erster Ordnung zu schreiben.

$$\begin{aligned}\dot{q}_j(t) &= \frac{p_j}{m} \\ \dot{p}_j(t) &= F_j(q, \frac{p}{m}, t)\end{aligned}$$

Hierbei ist  $p_j(t)$  der Impuls. Dieser technische Trick liegt den später zu behandelnden Hamilton'schen Bewegungsgleichungen zu Grunde:

$$\begin{aligned}\dot{q}_j(t) &= \frac{\partial H(q, p, t)}{\partial p_j} \\ \dot{p}_j(t) &= -\frac{\partial H(q, p, t)}{\partial q_j}\end{aligned}$$

<sup>1</sup>Der Einfachheit halber betrachten wir identische Teilchen mit Masse  $m_j = m$ .



Im einfachsten Fall eines konservativen Systemes ist  $H$  die Summe aus kinetischer und potentieller Energie, also

$$H = K + V.$$

Für ein Teilchen der Masse  $m$  in  $D = 1$  räumlichen Dimensionen ist

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$$

### 1.2.1 Freies Teilchen

Ein Teilchen, auf das keine Kräfte wirken, heißt freies Teilchen. Die Bewegungsgleichung eines freien Teilchens in  $D = 1$  räumlichen Dimensionen lautet

$$m\ddot{q}(t) = 0$$

Umgeschrieben als System von Differentialgleichungen erster Ordnung:

$$\begin{cases} \dot{q}(t) &= \frac{p(t)}{m} \\ \dot{p}(t) &= 0 \end{cases}$$

Dieses System besitzt die Lösung

$$\begin{aligned} p(t) &= mv_0 = \text{const.} \\ q(t) &= v_0t + q_0 \end{aligned}$$

Hierbei sind  $v_0$  und  $q_0$  Integrationskonstanten, die den Anfangsort  $q_0$  und die Anfangsgeschwindigkeit  $v_0$  festlegen.

Das Umschreiben eines Systems von  $3N$  DGL'n zweiter Ordnung als System von  $6N$  DGL'n erster Ordnung ist nicht eindeutig. Hier ist ein anderes, alternatives System von DGL'n erster Ordnung, welches ebenfalls äquivalent zu den Newton'schen Bewegungsgleichungen eines freien Teilchens ist:

$$\begin{cases} \dot{p} = F_0 = \text{const.} \\ m\dot{q} = p - F_0t \end{cases}$$

Es folgt als Lösung dieses alternativen Systems

$$\begin{aligned} p(t) &= F_0t + mv_0 \\ mq(t) &= \frac{1}{2}F_0t^2 + mv_0t - \frac{1}{2}F_0t^2 + mq_0, \end{aligned}$$

also

$$q(t) = v_0t + q_0$$

Die festgestellte Nicht-Eindeutigkeit der Definition des Impulses  $p(t)$  ist im Rahmen der später zu diskutierenden kanonischen Transformationen zu erklären. Es gibt also mehr als eine Möglichkeit von  $3N$  Differentialgleichung zweiter Ordnung zu einem System von  $6N$  DGLn erster Ordnung überzugehen.

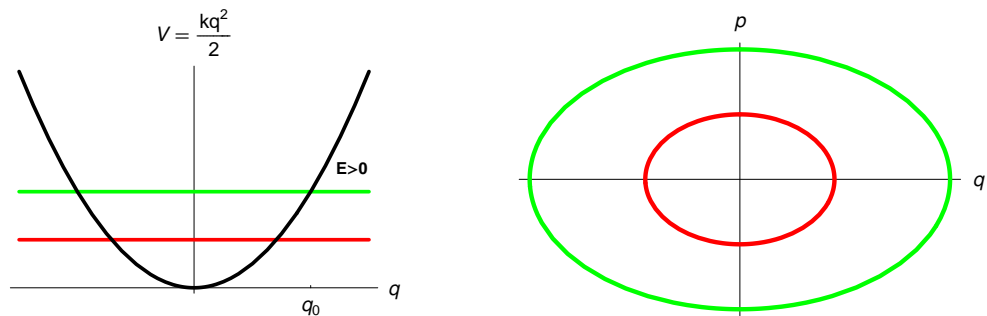


Abbildung 1.1: Potential und Phasenraumportrait des harmonischen Oszillators

### 1.2.2 Portrait des Harmonischen Oszillators im Phasenraum

Es ist sehr nützlich, die zeitl. Entwicklung eines mechanischen Systems als Bewegung eines Punktes  $\Gamma(t) = (q(t), p(t)) = (q_1, \dots, q_{3N}, p_1, \dots, p_{3N})$  im  $6N$  dimensionalen **Phasenraum** aufzufassen. Wir betrachten die Bewegung eines Massepunktes in  $D=1$  Dimensionen unter dem Einfluß einer anziehenden elastischen Kraft  $F = -kq$  ( $k = \text{const.}, k > 0$ ).

Man erhält aus der Newton'schen Bewegungsgleichung die Bewegungsgleichung des harmonischen Oszillators zu

$$m\ddot{q} + kq = 0.$$

Die zugeordneten Hamilton'schen Bewegungsgleichungen lauten:

$$\begin{aligned}\dot{q}(t) &= \frac{p(t)}{m} \\ \dot{p}(t) &= -kq(t)\end{aligned}$$

Mit der Kreisfrequenz  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ , ergibt sich die Lösung zu

$$\begin{aligned}q(t) &= a \cos(\omega t + \alpha) \\ p(t) &= -m\omega a \sin(\omega t + \alpha)\end{aligned}$$

Im Phasenraum bewegt sich der Punkt  $\Gamma(t) = (q(t), p(t))$  auf einer Ellipse mit den Halbachsen

$$\begin{aligned}a &= \sqrt{\frac{2E}{k}} \\ b &= m\omega a = \sqrt{2mE}\end{aligned}$$

wobei

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}q^2 = \frac{k}{2}a^2$$

die Gesamtenergie des Systems darstellt. Hierbei ist  $a$  die maximale Auslenkung des Oszillators. Die Trajektorie  $\Gamma(t) = (q(t), p(t))$  läuft im Phasenraum auf einer Ellipse:

$$\left(\frac{q(t)}{a}\right)^2 + \left(\frac{p(t)}{m\omega a}\right)^2 = 1$$

Die Fläche dieser Ellipse ergibt sich zu

$$A(E) = \pi \cdot a \cdot (m\omega a) = 2\pi E \sqrt{\frac{m}{k}}$$

Man erhält für die Ableitung der Fläche nach der Energie eine Konstante

$$\frac{dA}{dE} = 2\pi \sqrt{\frac{m}{k}}$$

Bei näherer Betrachtung ist diese Konstante gerade die Periode der zugeordneten harmonischen Schwingung

$$T = \frac{2\pi}{\omega} = 2\pi \sqrt{\frac{m}{k}}$$

Das Ergebnis  $T = \frac{dA}{dE}$  ist auch für anharmonische Schwingungen gültig, wie wir noch zeigen werden.

### 1.2.3 Abstoßende elastische Kraft

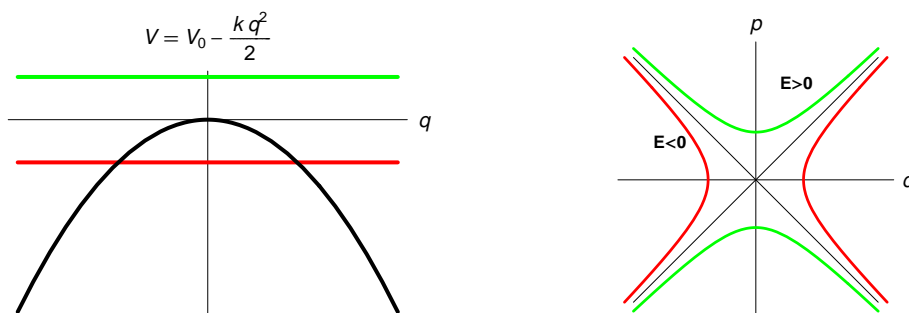


Abbildung 1.2: Potential und Phasenraumportrait für ein Teilchen unter dem Einfluss einer abstoßenden elastischen Kraft

Wir betrachten die Bewegung eines Massepunktes in  $D=1$  Dimensionen unter dem Einfluss einer abstoßenden elastischen Kraft  $F = +kq$  ( $k = \text{const.}, k > 0$ ). Die Newton'sche Bewegungsgleichung ergibt für das Teilchen die DGL

$$m\ddot{q} - kq = 0.$$

Die zugeordneten Hamilton'schen Bewegungsgleichungen lauten

$$\begin{aligned} \dot{q}(t) &= \frac{p(t)}{m} \\ \dot{p}(t) &= kq(t) \end{aligned}$$

Dieses System unterscheidet sich vom System des harmonischen Oszillators nur in einem Vorzeichen, dieser Umstand sorgt aber für ein völlig anderes Phasenportrait. Für dieses Problem gibt es zwei Lösungstypen:

$E < V_0$ :

$$\text{Lösung: } \begin{cases} q(t) = \pm a \cosh(\omega t) \\ p(t) = \pm m\omega a \sinh(\omega t) \end{cases}$$

Dies entspricht einem Teilchen mit einer auf den Ursprung hing gerichteten Anfangsgeschwindigkeit, von der Position  $q(-\infty) = \pm\infty$  ausgehend. Das Teilchen kehrt zum Zeitpunkt  $t = 0$  bei  $q = \pm a$  um. Für die Energie des Teilchens gilt

$$E = -\frac{k}{2}a^2 + V_0.$$

$E > V_0$ :

$$\text{Lösung: } \begin{cases} q(t) = \pm a \sinh(\omega t) \\ p(t) = \pm m\omega a \cosh(\omega t) \end{cases}$$

Für  $t = 0$  gilt  $p = \pm m\omega a$ . Das Teilchen kehrt nicht um, sondern überwindet den „Potentialwall“.

Wie im Phasenraumportrait gut zu erkennen ist, trennen Asymptoten  $p = \pm m\omega a$  die Gebiete in denen  $E < V_0$  und  $E > V_0$  gilt. Im Phasenraum bewegt sich der Punkt  $\Gamma(t) = (q(t), p(t))$  auf einer Hyperbel. Der Punkt  $(q = 0, p = 0)$  ist ein instabiler Gleichgewichtspunkt.

#### 1.2.4 Phasenraumportrait eines Systems in D=1 Dimensionen mit „W-Potential“

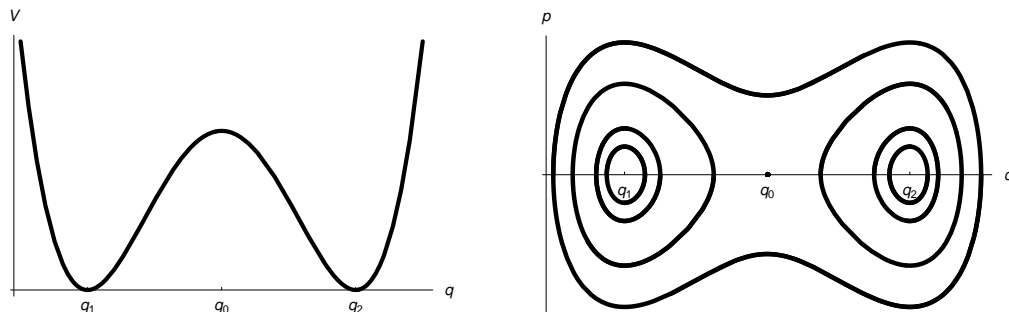


Abbildung 1.3: „W-Potential“ und zugehörige Trajektorienchar im Phasenraum

Die Newton'sche Bewegungsgleichung für die Bewegung eines Massenpunktes in  $D = 1$  Dimensionen unter dem Einfluss einer allgemeinen konservativen Kraft  $F(q) = -\frac{dV}{dq}$  lautet

$$m\ddot{q} + \frac{d}{dq}V(q) = 0.$$

In der Abbildung 1.3 ist als Beispiel ein W-Profil der potentiellen Energie dargestellt. In der Umgebung der lokalen Minima bei  $q = q_1$  und  $q = q_2$  kann der Verlauf des W-Profiles durch eine Parabel mit positiver Krümmung (Potential eines harmonischen Oszillators) angenähert werden. In der Umgebung des lokalen Maximums bei  $q = q_0$  kann der Verlauf des W-Profiles durch eine Parabel mit negativer Krümmung angenähert werden (Potential der abstoßenden konstanten Kraft). Entsprechend zeigt das Phasenraumportrait in den jeweiligen Gebieten genau den Verlauf, den man durch Zusammensetzung der beiden Lösungen für abstoßende und

anziehende Kraft erwarten würde. Ist die Energie nicht groß genug um das Maximum bei  $q_0$  zu überwinden, ähnelt das Phasenraumportrait um die Minima  $q_1$  und  $q_2$  mit kleiner werdender Energie immer mehr den Ellipsen im Phasenraumportrait des harmonischen Oszillators. Die Geraden

$$p = \pm \sqrt{mk}(q - q_0) \quad \text{mit} \quad k = - \left( \frac{d^2V}{dq^2} \right)_{q=q_0} > 0$$

separieren Gebiete im Phasenraum mit Energie  $E > V(q_0)$  und  $E < V(q_0)$ .

### 1.2.5 Phasenraumportrait eines Systems mit periodischer Kraft

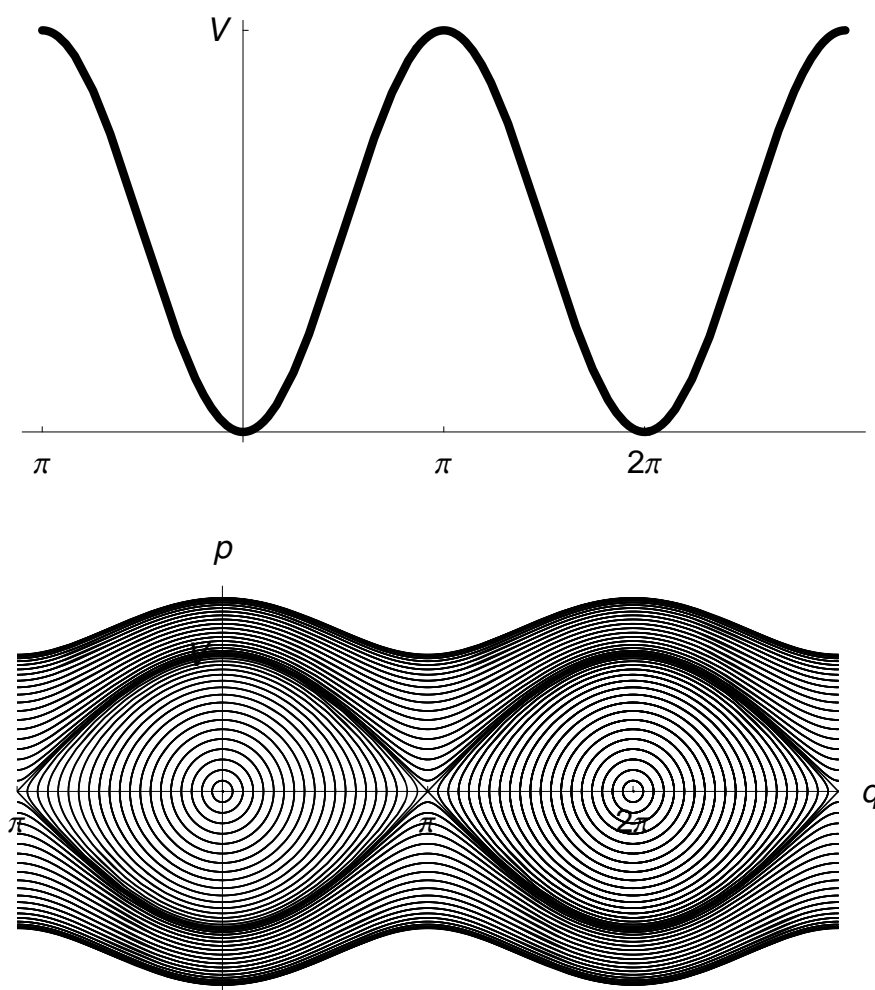


Abbildung 1.4: Phasenraumportrait einer periodischen Kraft

Als Beispiel soll das mathematische Pendel dienen. Dieses bewegt sich in einem Potential der Form

$$V = mgl(1 - \cos \phi).$$

Die Newton'sche Bewegungsgleichung bezüglich der Winkelvariablen  $\phi$  lautet

$$\ddot{\phi} + \frac{g}{l} \sin \phi = 0.$$

Wie im Bild zu sehen ist, setzt sich das Phasenraumportrait aus Abschnitten abstoßender Kraft und Abschnitten anziehender Kraft zusammen, die sich periodisch wiederholen. Drei Teile sind zu unterscheiden: Im Bereich um das Minimum geht das Phasenraumportrait mit fallender kinetischer Energie in das Portrait des harmonischen Oszillators über, größere kinetische Energien erzeugen Ellipsen. Ist die Energie des Pendels groß genug, so kommt es zum Überschlag. Die Trajektorie, die Ellipsen und Überschläge trennt, nennt man Separatrix, anschaulich stellt sie die Trajektorie dar, auf der das Pendel gerade genug Energie hat, um senkrecht nach oben zu stehen.

### 1.3 Periode eines nichtlinearen Oszillators

Für ein allgemeines Potential  $V(q)$  zeigen die bisher betrachteten Beispiele bereits, dass die Trajektorien  $\Gamma(t) = (q(t), p(t))$  im Phasenraum sehr komplizierte Bahnen durchlaufen können. Bei nichtlinearen Schwingungsproblemen durchläuft  $\Gamma(t)$  eine geschlossene Kurve, die erheblich von einer Ellipsenbahn abweichen kann. Nach der Umlaufzeit  $T$  wird die Kurve von Neuem durchlaufen:  $\Gamma(t + T) = \Gamma(t)$ . In einem konservativen System erfolgt die Bewegung unter der Nebenbedingung der Erhaltung der Energie:

$$E = \frac{p(t)^2}{2m} + V(q(t)) = \text{const.}$$

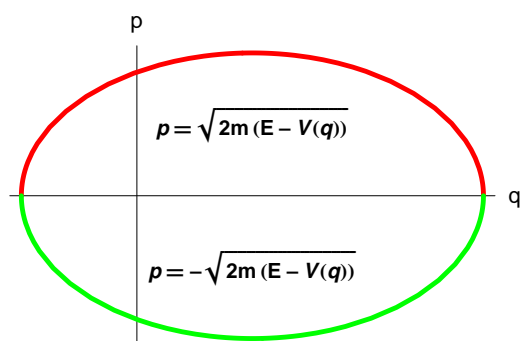
Diese Beziehung liefert den Impuls  $p(t)$  zu

$$p = \sqrt{2m(E - V(q))}$$

Die Zeit  $T$  für einen Umlauf ist

$$\begin{aligned} T &= \oint dt = \oint dq \frac{1}{\frac{dq}{dt}} = \oint dq \cdot \frac{m}{p} \\ &= \oint dq \frac{m}{\sqrt{2m(E - V(q))}} = \frac{d}{dE} \oint dq \sqrt{2m(E - V(q))} \\ &= \frac{d}{dE} \oint dq \cdot p = \frac{dA(E)}{dE} \end{aligned}$$

Hier ist  $A(E)$  das von der Trajektorie  $\Gamma(t)$  eingeschlossene Phasenraumvolumen (Fläche).



Es gilt

$$A(E) = \oint dq \cdot p = \left( \int_{C_+} + \int_{C_-} \right) dq \cdot p$$

Dabei ist  $C_+$  der (rot markierte) Weg über der  $q$ -Achse und entsprechend  $C_-$  der (grün markierte) Weg unter der  $q$ -Achse.

Damit ist allgemein gezeigt, dass auch für eine anharmonische Schwingung in  $D = 1$  Dimensionen die Ableitung der von der Trajektorie  $\Gamma(t)$  eingeschlossenen Fläche  $A(E)$  nach der Energie  $E$  gleich der Periodenzeit  $T$  für einen Umlauf ist:

$$T = \frac{dA(E)}{dE}$$

Mit Hilfe dieser Beziehung kann zum Beispiel die Schwingungsdauer des mathematischen Pendels explizit berechnet werden.

## 1.4 Zeitliche Evolution im Phasenraum

Wir betrachten eine „Wolke“ von Anfangswerten zur Zeit  $t = 0$ . Es sei  $\partial G(t = 0)$  der Rand einer Menge  $G(t = 0)$  von Anfangswerten im Phasenraum:

$$G(t = 0) = \left\{ (q_0, p_0) \left| \begin{array}{l} q(t = 0) = q_0 \\ p(t = 0) = p_0 \end{array} \right. \right\}$$

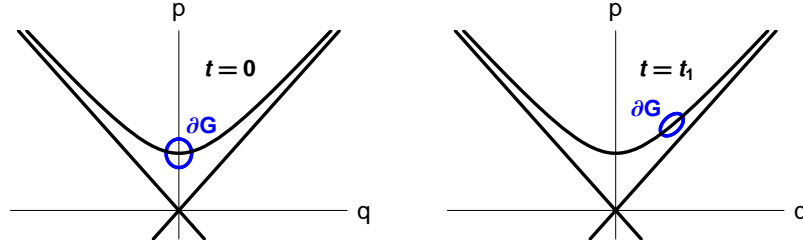
für ein Teilchen der Masse  $m$ , welches sich in  $D = 1$  Dimensionen unter dem Einfluss einer abstoßenden konstanten Kraft ( $k > 0$ ) bewegt.

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{p}{m} \\ \dot{p} = kq \end{cases},$$

Die Integration dieser Bewegungsgleichungen zu jeweils verschiedenen Startwerten  $(q_0, p_0)$  ergibt mit  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$  eine Schar von Lösungen:

$$\begin{aligned} q(\lambda, t) &= Q(\lambda) \cosh(\omega t) + \frac{P(\lambda)}{m\omega} \sinh(\omega t) \\ p(\lambda, t) &= m\omega Q(\lambda) \sinh(\omega t) + P(\lambda) \cosh(\omega t) \end{aligned}$$

Hier parametrisiert  $\lambda$  die Gesamtheit der Startwerte  $(q_0, p_0)$ , die auf dem Rand  $\partial G(t = 0)$  des Gebietes  $G(t = 0)$  im Phasenraum liegen:

Abbildung 1.5: Phasenraum zu zwei Zeitpunkten  $t = 0$  und  $t = t_1$ 

$$q(\lambda, t = 0) = Q(\lambda) = Q_0 \cdot \cos(\lambda) \quad (1.1)$$

$$p(\lambda, t = 0) = P(\lambda) = P_1 - P_0 \sin(\lambda) \quad (1.2)$$

Im vorliegenden Fall ist  $G(t = 0)$  eine Wolke von Anfangswerten in Gestalt einer Ellipse:

$$\left(\frac{Q(\lambda)}{Q_0}\right)^2 + \left(\frac{P(\lambda) - P_1}{P_0}\right)^2 \leq 1$$

Im Verlauf der Zeit deformiert sich diese Wolke von Anfangswerten  $G(t = 0)$  zu einer immer mehr gestreckten und gestauchten Ellipse  $G(t)$  (siehe Abbildung 1.5). Der Flächeninhalt  $|G(t)|$  des Gebietes  $G(t)$  bleibt dabei konstant. Wir berechnen diesen unschwer als Integral über den Rand  $\partial G(t)$ :

$$\begin{aligned} |G(t)| &= \int_{\partial G_t} dq(\lambda, t) \cdot p(\lambda, t) = \int_0^{2\pi} d\lambda \frac{dq(\lambda, t)}{d\lambda} \cdot p(\lambda, t) \\ &= \int_0^{2\pi} d\lambda \left[ \frac{dQ(\lambda)}{d\lambda} \cosh(\omega t) + \frac{1}{m\omega} \frac{P(\lambda)}{d\lambda} \sinh(\omega t) \right] \cdot \left[ m\omega Q(\lambda) \sinh(\omega t) + P(\lambda) \cosh(\omega t) \right] \\ &= \pi Q_0 P_0 [\cosh^2(\omega t) - \sinh^2(\omega t)] = \pi Q_0 P_0 \\ &= |G(t = 0)| \end{aligned}$$

Also haben wir herausgefunden: der Flächeninhalt  $|G(t)|$  der gestreckten Ellipse  $G(t)$  ist gleich dem Flächeninhalt  $|G(t = 0)|$  des Gebietes  $G(t = 0)$ . Der Flächeninhalt bleibt bei der zeitlichen Evolution konstant.

Dieses für den Spezialfall der Dynamik eines Teilchens unter dem Einfluss einer konstanten abstoßenden Kraft und einer Wolke von Anfangswerten in Gestalt einer Ellipse im Phasenraum hergeleitete Ergebnis darf größere Allgemeinheit beanspruchen.

Betrachte die Dynamik eines Teilchens der Masse  $m$  in  $D = 1$  Dimensionen unter dem Einfluss einer allgemeinen konservativen Kraft  $F(q) = -\frac{dV(q)}{dq}$ :

$$m\ddot{q}(\lambda, t) + \frac{dV[q(\lambda, t)]}{dq} = 0.$$

Die Energie einer Wolke von Anfangswerten ist eine Erhaltungsgröße bezüglich zeitlicher Evolution:

$$E(\lambda) = \frac{p(\lambda, t)^2}{2m} + V[q(\lambda, t)],$$



also

$$\frac{dE(\lambda)}{dt} = 0.$$

Die Koordinaten der Phasenraumpunkte auf dem Rand  $\partial G(t)$  des Gebiets  $G(t)$  zur Zeit  $t$  seien nun  $q(\lambda, t)$  und  $p(\lambda, t)$ . Wenn der Parameter von  $\lambda = 0$  bis  $\lambda = 2\pi$  läuft, so durchläuft der Punkt  $\Gamma(\lambda, t) = (q(\lambda, t), p(\lambda, t))$  bei festgehaltener Zeit  $t$  den Rand  $\partial G(t)$  des Gebietes  $G(t)$ .

Wir berechnen jetzt die Ableitung der von der geschlossenen Randkurve eingeschlossenen Fläche

$$|G(t)| = \oint dq(\lambda, t) \cdot p(\lambda, t) = \int_0^{2\pi} d\lambda \frac{dq(\lambda, t)}{d\lambda} p(\lambda, t)$$

zur Zeit  $t$ .

$$\frac{d}{dt}|G(t)| = \frac{d}{dt} \int_0^{2\pi} d\lambda \left[ \frac{\partial q}{\partial \lambda}(\lambda, t) \cdot p(\lambda, t) \right]$$

Zieht man die Ableitung unter das Integral, erhält man gemäß der Produktregel

$$= \int_0^{2\pi} d\lambda \left[ \frac{\partial^2 q}{\partial t \partial \lambda} p(\lambda, t) + \frac{\partial q}{\partial \lambda} \frac{\partial p}{\partial t} \right]$$

Partielles Integrieren des ersten Terms bzgl.  $\lambda$  liefert

$$= \int_0^{2\pi} d\lambda \left[ -\frac{dq}{dt} \frac{\partial p}{\partial \lambda} + \frac{\partial q}{\partial \lambda} \frac{dp}{dt} \right]$$

Die Randterme bei der partiellen Integration fallen weg wegen  $q(\lambda = 0, t) = q(\lambda = 2\pi, t)$  und  $p(\lambda = 0, t) = p(\lambda = 2\pi, t)$  (geschlossene Randkurve). Unter Berücksichtigung der Newton'schen Dynamik  $\frac{d}{dt}q = \frac{p}{m}$  und  $\frac{d}{dt}p = -\frac{\partial}{\partial q}V(q)$  folgt schließlich

$$\begin{aligned} &= \int_0^{2\pi} d\lambda \left[ -\frac{p}{m} \frac{\partial p}{\partial \lambda} - \frac{\partial q}{\partial \lambda} \frac{\partial V(q)}{\partial q} \right] = - \int_0^{2\pi} d\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[ \frac{p^2}{2m} + V(q) \right] \\ &= - \int_0^{2\pi} d\lambda \frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} = -(E(\lambda = 2\pi) - E(\lambda = 0)) = 0 \end{aligned}$$

Es gilt  $\frac{\partial E}{\partial \lambda} \neq 0$ , da Teilchen mit unterschiedlichen Startwerten  $(q_0, p_0)$  verschiedene Energie haben können. Damit ist bewiesen:

$$|G(t)| = |G(t = 0)| = \text{const.}$$

Für den Fluss im Phasenraum betrachtet man ein Gebiet in der  $(p, q)$ -Ebene. Jeder Punkt eines solchen Gebietes stellt einen erlaubten Anfangswert (einen „Zustand“) für die Position  $q(t = 0)$

und den Impuls  $p(t = 0)$  eines Teilchens dar („Wolke“ von Anfangswerten). Bewegt sich nun jeder Punkt  $f(t) = (q(t), p(t))$  gemäß der Dynamik

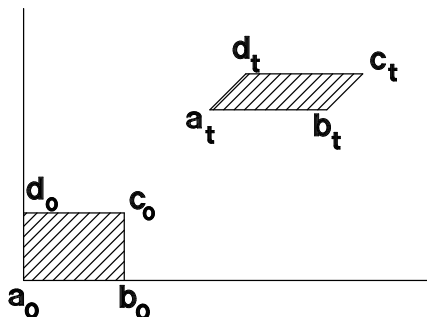
$$\begin{aligned}\dot{q}(t) &= \frac{p(t)}{m} \\ \dot{p}(t) &= f(q, p, t)\end{aligned}$$

im Phasenraum, so ändert sich die Gestalt der „Anfangswert-Wolke“ zum Zeitpunkt  $t = 0$  im Laufe der Zeit. Diese Verwandlung des Gebietes  $G_0$  zum Gebiet  $G_t$  kann als „Fluss“ im Phasenraum in Analogie zur Bewegung von Partikeln in einer strömenden Flüssigkeit aufgefasst werden. Falls die einwirkenden Kräfte konservativ sind besteht eine enge Analogie zu einer inkompressiblen Flüssigkeit.

Die festgestellte Konstanz des Phasenraumvolumens stellt einen Spezialfall des *Satzes von Liouville* dar, der besagt, dass das Phasenraumvolumen unter kanonischen Transformationen invariant bleibt.

### 1.4.1 Beispiel - Freier Fall

Wir betrachten die Bewegung eines Massenpunktes im konstanten Gravitationsfeld:



$$p(t) = mgt + p_0$$

$$q(t) = \frac{1}{2}gt^2 + \frac{p_0}{m}t + q_0$$

Die Wolke von Anfangswerten ist ein rechteckiges Gebiet im Phasenraum:

$$G(t = 0) = \left\{ (q, p) \left| \begin{array}{l} 0 \leq q \leq Q \\ 0 \leq p \leq P \end{array} \right. \right\}$$

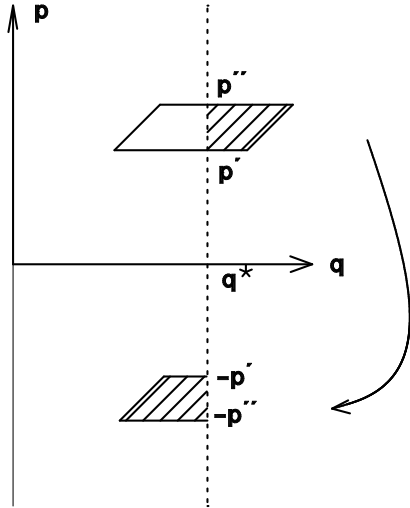
Die Punkte dieses Rechtecks werden im Verlauf der Zeit in ein Parallelogramm  $G(t)$  abgebildet

$$G(t) = \left\{ (q(t), p(t)) \left| \begin{array}{l} \text{Eckpunkte des Parallelogramms} \\ a_t = \left( \frac{1}{2}gt^2, mgt \right) \\ b_t = \left( \frac{1}{2}gt^2 + q_0, mgt \right) \\ c_t = \left( \frac{1}{2}gt^2 + \frac{p_0 t}{m} + q_0, mgt + p_0 \right) \\ d_t = \left( \frac{1}{2}gt^2 + \frac{p_0 t}{m}, mgt + p_0 \right) \end{array} \right. \right\}$$

Natürlich gilt wieder

$$|G(t)| = (b_t - a_t)_1 \cdot (d_t - a_t)_2 = p_0 \cdot q_0 = |G(t = 0)|$$

### 1.4.2 Beispiel - Reflektion an einer Wand



Wir betrachten den elastischen Stoß eines freien Teilchens in  $D = 1$  Dimensionen an einer Wand an der Stelle  $q = q^*$ . Vor dem Auftreffen auf die Wand gilt:

$$p(t) = p_0$$

$$q(t) = \frac{p_0}{m}t + q_0$$

Nach dem Stoß kehrt sich die Richtung des Impulses um:  $p_0 \rightarrow -p_0$ . Sei

$$|G(t=0)| = \int_{G(t=0)} dq_0 dp_0$$

der Flächeninhalt einer Wolke von Anfangswerten im Phasenraum.

Dieses Gebiet wird durch die Dynamik des freien Teilchens auf ein neues Gebiet  $G(t)$  mit Flächeninhalt

$$|G(t)| = \int_{G(t)} dq(t) dp(t)$$

abgebildet. Nach der Transformationsregel für Bereichsintegrale (siehe [Apostol \(1974\)](#)) besteht der Zusammenhang:

$$G(t) = \int_{G(t=0)} \det \underbrace{\begin{vmatrix} \frac{\partial p(t)}{\partial p_0} & \frac{\partial p(t)}{\partial q_0} \\ \frac{\partial q(t)}{\partial p_0} & \frac{\partial q(t)}{\partial q_0} \end{vmatrix}}_{\text{Jacobi-Determinante}} dp_0 dq_0$$

Die Elemente der Jacobideterminante<sup>2</sup> berechnen sich zu

$$\det \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ \pm \frac{t}{m} & 1 \end{vmatrix} = 1$$

Der Inhalt des Gebietes  $G(t)$  ist manifest zeitlich konstant!

$$|G(t)| = |G(t=0)|$$

### 1.4.3 Beispiel - Harmonischer Oszillator

Die gefundene Flächenerhaltung einer Wolke von Anfangswerten im Phasenraum lässt sich auch für den harmonischen Oszillator zeigen:

$$m\ddot{q}(t) + kq = 0$$

<sup>2</sup>Die Jacobideterminante wird oft kürzer in der Form  $\frac{\partial(q,p)}{\partial(q_0,p_0)}$  dargestellt.

Das zugeordnete System von DGL'n erster Ordnung ist

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} q(t) \\ p(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{m} \\ -k & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q(t) \\ p(t) \end{bmatrix}$$

Um die beiden Differentialgleichungen zu entkoppeln, betrachten wir nun als Erstes die Matrix

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{m} \\ -k & 0 \end{pmatrix} =: M$$

Eine Lösung ist durch die Exponentialfunktion<sup>3</sup> gegeben. Mit der Matrix  $M$  ergibt sich die Lösung des DGL-Systems in kompakter Form zu

$$\begin{bmatrix} q(t) \\ p(t) \end{bmatrix} = \exp(tM) \begin{bmatrix} q(t=0) \\ p(t=0) \end{bmatrix}$$

mit

$$\begin{aligned} \exp(tM) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n M^n}{n!} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{t^{2j} M^{2j}}{(2j)!} + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{t^{2j+1} M^{2j+1}}{(2j+1)!} \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{t^{2j} \left(-\frac{k}{m}\right)^j}{(2j)!} \mathbb{1} + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{t^{2j+1} \left(-\frac{k}{m}\right)^j}{(2j+1)!} M \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j \left(t\sqrt{\frac{k}{m}}\right)^{2j}}{(2j)!} \mathbb{1} + \frac{1}{\sqrt{\frac{k}{m}}} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j \left(t\sqrt{\frac{k}{m}}\right)^{2j+1}}{(2j+1)!} M \end{aligned}$$

In der letzten Zeile wurde benutzt:

$$M^2 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{m} \\ -k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{m} \\ -k & 0 \end{pmatrix} = -\frac{k}{m} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = -\frac{k}{m} \mathbb{1}$$

Es folgt mit  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

$$\begin{aligned} q(t) &= q_0 \cdot \cos(\omega t) + \frac{p_0}{m\omega} \cdot \sin(\omega t) \\ p(t) &= -m\omega q_0 \sin(\omega t) + p_0 \cos(\omega t) \end{aligned}$$

Die Jacobideterminante ergibt sich zu

$$\frac{\partial(q(t), p(t))}{\partial(q_0, p_0)} = \det \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & \frac{1}{m\omega} \sin(\omega t) \\ -m\omega \sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{pmatrix} = \cos^2(\omega t) + \sin^2(\omega t) = 1$$

Es folgt also nach der Substitutionsregel für Bereichsintegrale für den Inhalt des Gebiets  $G(t)$ :

$$|G(t)| = \int_{G(t)} dq(t) dp(t) = \int_{G(t=0)} \frac{\partial(q(t), p(t))}{\partial(q_0, p_0)} dq_0 dp_0$$

<sup>3</sup>Die Exponentialfunktion mit einer Matrix  $M$  im Argument ist folgendermaßen definiert:

$$\exp(M) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{M^n}{n!}$$

Da die Funktionaldeterminante gleich 1 ist, folgt weiter

$$= \int_{G(t=0)} dq_0 dp_0 = |G(t=0)|$$

Hier ist  $G(t)$  das durch die Abbildung  $(q(t), p(t))$  vermittelte Bild des Urbilds  $G(t=0)$  im Phasenraum.

#### 1.4.4 Allgemeine konservative Kraft

Wir betrachten nun die Dynamik eines Massenpunktes in  $D = 1$  Dimensionen unter dem Einfluss einer (allgemeinen) konservativen Kraft  $F(q) = -\frac{\partial}{\partial q} V(q)$ :

$$\begin{aligned} \dot{q}(t) &= \frac{p(t)}{m} \\ \dot{p}(t) &= -\frac{\partial V(q)}{\partial q}. \end{aligned}$$

Für eine infinitesimale Zeitspanne  $\Delta t$  ergibt eine Taylorentwicklung:

$$\begin{aligned} q(t + \Delta t) &= q(t) + \frac{p(t)}{m} \Delta t + o(\Delta t)^2 \\ p(t + \Delta t) &= p(t) - \frac{\partial V(q(t))}{\partial q} \Delta t + o(\Delta t)^2 \end{aligned}$$

Die Berechnung der Jacobideterminante ergibt

$$\begin{aligned} \frac{\partial[q(t + \Delta t), p(t + \Delta t)]}{\partial[q(t), p(t)]} &= \det \begin{pmatrix} \frac{\partial q(t + \Delta t)}{\partial q(t)} & \frac{\partial q(t + \Delta t)}{\partial p(t)} \\ \frac{\partial p(t + \Delta t)}{\partial q(t)} & \frac{\partial p(t + \Delta t)}{\partial p(t)} \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} 1 & \frac{\Delta t}{m} \\ -\frac{\partial^2 V(q)}{\partial q^2} \Delta t & 1 \end{pmatrix} \\ &= 1 + \frac{(\Delta t)^2}{m} \left( \frac{\partial^2 V(q)}{\partial q^2(t)} \right)_{q=q(t)} \end{aligned}$$

Zur Zeit  $t + \Delta t$  nimmt das Gebiet den Flächeninhalt  $G(t + \Delta t)$  ein.

$$\begin{aligned} |G(t + \Delta t)| &= \int_{G(t+\Delta t)} dq(t + \Delta t) dp(t + \Delta t) = \int_{G(t)} \underbrace{\frac{\partial(q(t + \Delta t), p(t + \Delta t))}{\partial(q(t), p(t))}}_{1+o(\Delta t)^2} dq(t) dp(t) \\ &= \int_{G(t)} dq(t) dp(t) + o(\Delta t)^2 = |G(t)| + o(\Delta t)^2 \end{aligned}$$

Somit folgt

$$\frac{|G(t + \Delta t)| - |G(t)|}{\Delta t} = o(\Delta t)$$

und schließlich für  $\Delta t \rightarrow 0$ :

$$\frac{d}{dt} |G(t)| = 0.$$

Dieser Sachverhalt ist in Übereinstimmung mit dem *Satz von Liouville* (nach Joseph Liouville<sup>4</sup>). Für den Spezialfall der Newton-Dynamik in  $D = 1$  räumlichen Dimensionen eines Teilchens unter dem Einfluss einer konservativen Kraft haben wir gezeigt:

$$\begin{aligned} |G(t=0)| &= \oint_{\partial G(t=0)} dq \cdot p = \oint_{\partial G(t)} dq \cdot p = |G(t)| \\ &= \int_{G(t=0)} dq_0 dp_0 = \int_{G(t)} dq(t) dp(t) = \int_{G(t)} \frac{\partial(q,p)}{\partial(q_0,p_0)} dq_0, dp_0 \end{aligned}$$

Die im Abschnitt 1.4.4 verwendete Beweisführung der Konstanz des Phasenraumvolumens im Lauf der zeitlichen Evolution des Systems kann leicht auf den allgemeinen Fall der Newton-Dynamik von  $N$  Teilchen, die sich unter dem Einfluss konservativer Kräfte bewegen, verallgemeinert werden. Dieser Sachverhalt spielt sowohl in der statistischen Mechanik, wie auch in der Quantenmechanik eine Rolle, denn die Aussage ist nichts anderes, als dass die Dichte von frei fliegenden Teilchen im Ortsraum nur dann erhöht werden kann, wenn gleichzeitig die Dichte im Impulsraum verringert wird (Satz von Liouville). Die Konstanz des Phasenraumvolumens im Lauf der zeitlichen Evolution ist i.A. nicht gegeben, wenn es sich um eine sog. „Nicht-Hamilton'sche“ Dynamik handelt.

## 1.5 Zyklische Variable und periodischer Orbit

Betrachten wir ein Gebiet  $G(t)$  im Phasenraum für die Dynamik eines Teilchens in  $D = 1$  Dimensionen, so ist der Rand  $\partial G(t)$  des Gebietes bei einer periodischen Bewegung des Teilchens eine geschlossene Kurve. Diese Kurve wollen wir hier als periodischen Orbit bezeichnen. Im Flussbild des Phasenraums bedeutet dies, dass die Punkte von  $\partial G(t = 0)$  im Lauf der zeitlichen Evolution des Systems auf sich selbst abgebildet werden!

In diesem Fall nennt man das Integral

$$I = \int_{\partial G_0} dq \cdot p$$

„zyklische Variable“. Für den harmonischen Oszillator sei diese exemplarisch vorgerechnet:

$$\begin{aligned} q(\lambda, t) &= a \cos(\omega t + \lambda) \\ p(\lambda, t) &= -m\omega a \sin(\omega t + \lambda) \end{aligned}$$

Bei festgehaltener Zeit  $t$  durchlaufen die Punkte  $q(\lambda, t)$  und  $p(\lambda, t)$  den Orbit  $G(t)$ , wenn  $\lambda$  von 0 bis  $2\pi$  variiert. Wir berechnen unschwer

$$I = \oint_{\partial G_0} dq \cdot p = \int_0^{2\pi} d\lambda m\omega a [\sin(\omega t + \lambda) \cdot a \cdot \sin(\omega t + \lambda)] \quad (1.3)$$

$$= \pi m\omega a^2 = 2\pi \frac{m}{k} \omega \left( \frac{ka^2}{2} \right) = \frac{2\pi}{\omega} E \quad (1.4)$$

wobei  $E = \frac{k}{2} a^2$ .

---

<sup>4</sup>Joseph Liouville

In der „alten“ Quantenmechanik von Sommerfeld<sup>5</sup> und Bohr<sup>6</sup> wurde gemäß der Vorschrift  $I = nh$  eine Quantisierung<sup>7</sup> eingeführt. Dies führt zu erlaubten Energieniveaus  $E_n = n\hbar\omega$  mit  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ . Das Resultat der „neuen“ Quantenmechanik nach [Werner Heisenberg](#) und [Erwin Schrödinger](#) enthält als Ergebnis für die diskreten Energieniveaus des harmonischen Oszillators noch die so genannte Nullpunktenergie:

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$$

---

<sup>5</sup>Arnold Sommerfeld, deutscher Mathematiker und theoretischer Physiker.

<sup>6</sup>Niels Bohr, dänischer Physiker, seinen Namen trägt das „[Bohr'sche Atommodell](#)“

<sup>7</sup> $h$  ist das Planck'sche Wirkungsquantum,  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$



## Kapitel 2

# Charakteristische Funktion von Hamilton

### 2.1 Wirkungsintegral in D=1 räumlichen Dimensionen

Ausgehend von dem Ausdruck für die Gesamtenergie in einem konservativen System

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(q) \quad (2.1)$$

ergibt sich sofort der Energieerhaltungssatz:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{p}{m} \dot{p} + \frac{\partial V}{\partial q} \dot{q} = \frac{p}{m} \left( -\frac{\partial V}{\partial q} \right) + \left( \frac{\partial V}{\partial q} \right) \frac{p}{m} = 0$$

Auflösen der Gleichung 2.1 liefert den Impuls  $p$  als Funktion der Energie  $E$  und der Lagekoordinate  $q$ :

$$p(q, E) = \sqrt{2m(E - V(q))} \quad (2.2)$$

Als nächstes betrachten wir das so genannte „Wirkungsintegral“<sup>1</sup> für Systeme mit Energie als Erhaltungsgröße:

$$S(q_2, q_1, E) = \int_{q_1}^{q_2} dq \cdot p(q, E) \quad (2.3)$$

Indem wir nach der oberen bzw. unteren Integrationsgrenze ableiten, ergibt sich:

$$p_1 = -\frac{\partial S}{\partial q_1}(q_2, q_1, E) \quad (2.4)$$

$$p_2 = \frac{\partial S}{\partial q_2}(q_2, q_1, E) \quad (2.5)$$

---

<sup>1</sup>Eine **Wirkung** ist das Produkt aus Energie und Zeit. Der später zu besprechende Hamiltonformalismus ist ein von der Wirkung ausgehender Formalismus, der verlangt, dass ein System sich immer so verhält, dass seine Wirkung stationär ist. Auch die Maxwell'schen Gleichungen der Elektrodynamik und die Schrödingergleichung der Quantenmechanik kann man aus der Forderung einer stationären Wirkung herleiten.

Anhand des Wirkungsintegrals lässt sich die Zeitspanne ausrechnen, um vom Ort  $q_1$  nach  $q_2$  zu gelangen. Beachte: Die Ableitung der Wirkung nach der Energie ist die Zeit.

$$\begin{aligned}
 t_2 - t_1 &= \int_{t_1}^{t_2} dt = \int_{q_1}^{q_2} dq \frac{dt}{dq} = \int_{q_1}^{q_2} dq \frac{1}{\frac{dq}{dt}} = \int_{q_1}^{q_2} dq \frac{m}{p} \\
 &= \int_{q_1}^{q_2} dq \frac{m}{\sqrt{2m(E - V(q))}} = \frac{\partial}{\partial E} \int_{q_1}^{q_2} dq \sqrt{2m(E - V(q))} \\
 &= \frac{\partial}{\partial E} S(q_2, q_1, E)
 \end{aligned} \tag{2.6}$$

Für den Spezialfall einer periodischen Bewegung gilt:

$$\begin{aligned}
 q_2 &= q(t_2) = q(t_1 + T) = q(t_1) = q_1 \\
 p_2 &= p(t_2) = p(t_1 + T) = p(t_1) = p_1
 \end{aligned}$$

In diesem Fall ist  $S(q_2, q_1, E)$  gleich der vom Orbit mit Periode  $T$  eingeschlossenen Fläche  $A(E)$  im Phasenraum. Damit ist

$$t_2 - t_1 = T = \frac{\partial}{\partial E} S(q_2, q_1, E) = \frac{dA(E)}{dE},$$

das bereits im vorherigen Kapitel abgeleitete Ergebnis.

Zur Illustration berechnen wir das Wirkungsintegral für den Harmonischen Oszillator:

$$V(q) = \frac{k}{2} q^2.$$

Wir bezeichnen für eine beliebige Endzeit  $t_2 = t$  den Endpunkt  $q_2$  als  $q(t)$  und den Anfangspunkt  $q_1$  zur Zeit  $t = 0$  als  $q_0$ :

$$S(q, q_0, E) = \int_{q_0}^q dq' \sqrt{2m(E - \frac{1}{2}kq'^2)}$$

Mit  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$  und  $E = \frac{k}{2}a^2$ , wobei  $a$  die maximale Auslenkung ist, folgt:

$$\begin{aligned}
 &= m\omega \int_{q_0}^q dq' \sqrt{a^2 - q'^2} \\
 &= m\omega \left[ q' \sqrt{a^2 - q'^2} + a^2 \arcsin \left( \frac{q'}{a} \right) \right]_{q'=q_0}^{q'=q(t)} \\
 t &= \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{\omega} \left( \arcsin \left( \frac{q(t)}{a} \right) - \arcsin \left( \frac{q_0}{a} \right) \right)
 \end{aligned}$$

Im Spezialfall  $q_0 = a$  folgt

$$t = \frac{1}{\omega} \left( \arcsin \left( \frac{q(t)}{a} \right) - \frac{\pi}{2} \right)$$

Durch Umkehrung ergibt sich die Bahnkurve des Harmonischen Oszillators:

$$q(t) = a \cos(\omega t)$$

Abschließend noch eine Bemerkung: da der Impuls  $p$  Gradient des Wirkungsintegrals ist,

$$p = \frac{d}{dq} S(q, q_0, E),$$

ergibt sich durch Einsetzen in Gleichung (2.1):

$$\frac{1}{2m} \left( \frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + V(q) = E.$$

Dies ist eine spezielle Form der Differentialgleichung von Hamilton-Jacobi.

## 2.2 Wirkungsintegral in D=3 räumlichen Dimensionen

Die Nützlichkeit der charakteristischen Funktion wird in vollem Umfang erst bei Problemen in  $D = 2$  oder  $D = 3$  Dimensionen deutlich. Sei  $\mathbf{q}(t)$  die 3D-Bahnkurve (Trajektorie) die ein Teilchen der Masse  $m$  unter dem Einfluss einer konservativen Kraft  $\mathbf{F}(q) = -\vec{\nabla}V(q)$  durchläuft. Die Position  $\mathbf{q}(t)$  und den Impuls  $\mathbf{p}(t)$  können wir in einem kartesischen Koordinatensystem als Linearkombination von drei orthogonalen Einheitsvektoren  $\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3$  darstellen:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}(t) &= q_1(t)\hat{e}_1 + q_2(t)\hat{e}_2 + q_3(t)\hat{e}_3 \\ \mathbf{p}(t) &= p_1(t)\hat{e}_1 + p_2(t)\hat{e}_2 + p_3(t)\hat{e}_3 \end{aligned}$$

Die Newton'schen Differentialgleichungen schreiben wir um als System erster Ordnung zu:

$$\begin{aligned} \dot{q}_j(t) &= \frac{1}{m} p_j(t) \\ \dot{p}_j(t) &= -\frac{\partial}{\partial q_j} V(q_1, q_2, q_3) \end{aligned}$$

Die Bewegung des Teilchens in  $D = 3$  räumlichen Dimensionen erfolgt unter der Nebenbedingung:

$$E = \frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m} + V(q_1, q_2, q_3) = \text{const.}$$

Eventuell existieren neben der Energie  $E$  weitere Erhaltungsgrößen bei der Bewegung des Teilchens, z.B. der Drehimpuls. Solche zusätzlichen Erhaltungsgrößen bezeichnen wir mit  $J$ .

Das Wirkungsintegral ist als Wegintegral vom Anfangspunkt  $\mathbf{q}_0$  zur Zeit  $t = 0$  zum Endpunkt  $\mathbf{q}$  zur Zeit  $t$  definiert:

$$\begin{aligned} S(\mathbf{q}, \mathbf{q}_0, E, J) &= \int_{C[\mathbf{q}, \mathbf{q}_0]} \langle d\mathbf{q}, \mathbf{p} \rangle = \int_{\mathbf{q}_0}^{\mathbf{q}} \langle d\mathbf{q}, \mathbf{p} \rangle \\ &= \int_{\mathbf{q}_0}^{\mathbf{q}} (dq_1 p_1 + dq_2 p_2 + dq_3 p_3) \\ &= \int_{\mathbf{q}_0}^{\mathbf{q}} |d\mathbf{q}| |\mathbf{p}| \cos \gamma \end{aligned} \tag{2.7}$$

Durch Anwenden des Gradienten auf das Wirkungsintegral bekommen wir eine Beziehung zwischen dem Impulsvektor  $\mathbf{p}$  zur Zeit  $t$  und der Wirkung  $S$ :

$$\begin{aligned}\mathbf{p} &= \vec{\nabla}_{\mathbf{q}} S(\mathbf{q}, \mathbf{q}_0, E, J) \\ &= \frac{\partial S}{\partial q_1} \hat{e}_1 + \frac{\partial S}{\partial q_2} \hat{e}_2 + \frac{\partial S}{\partial q_3} \hat{e}_3\end{aligned}$$

Der Integrationsweg verläuft im Ortsraum des Teilchens vom Anfangspunkt  $\mathbf{q}_0$  zum Endpunkt  $\mathbf{q}$ . Dabei ist der Wert des Wirkungsintegrals 2.7 unabhängig vom gewählten Pfad  $\mathcal{C}[\mathbf{q}, \mathbf{q}_0]$  von  $\mathbf{q}_0$  nach  $\mathbf{q}$ . Diese Eigenschaft kann dazu verwendet werden, Berechnungen zu vereinfachen, indem man den Integrationsweg geschickt wählt.

## 2.3 Beispiel - Wurfparabel

Wir betrachten ein Teilchen der Masse  $m$  im homogenen Schwerfeld der Erde, das in einem bestimmten Winkel zur Erdoberfläche zur Zeit  $t = 0$  mit einer bestimmten Geschwindigkeit  $\mathbf{v}^{(A)}$  abgeschossen wird. Die Startwerte des Teilchens zur Zeit  $t=0$  sind

$$\begin{aligned}\mathbf{p}(t = 0) &= \mathbf{p}_A = (p_{1,A}, 0, p_{3,A}) = m(v_{1,A}, 0, v_{3,A}) \\ \mathbf{q}(t = 0) &= \mathbf{q}_A = (0, 0, 0)\end{aligned}$$

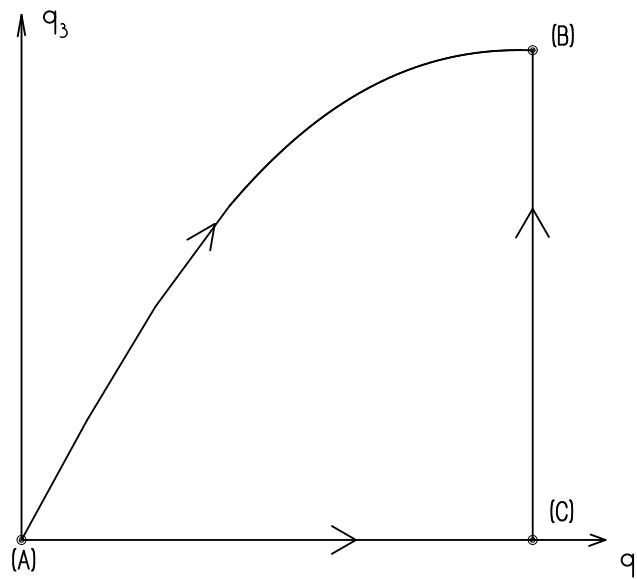


Abbildung 2.1: Integrationswege

Wir bestimmen den Integrationsweg wie in Abbildung 2.1 gezeigt. Anstatt über die Flugbahn  $\mathcal{C}[\mathbf{q}_B, \mathbf{q}_A]$  des Teilchens ausgehend vom Anfangspunkt  $\mathbf{q}_A$  zum Endpunkt  $\mathbf{q}_B$  zu integrieren, machen wir von der Freiheit Gebrauch, den Integrationsweg beliebig wählen zu dürfen. Wir integrieren nun über den Pfad  $\mathcal{C}[\mathbf{q}_C, \mathbf{q}_A]$  von  $\mathbf{q}_A$  nach  $\mathbf{q}_C$  und im Anschluss daran über den Pfad  $\mathcal{C}[\mathbf{q}_B, \mathbf{q}_C]$  von  $\mathbf{q}_C$  nach  $\mathbf{q}_B$ . Auf dem Pfad  $\mathcal{C}[\mathbf{q}_C, \mathbf{q}_A]$  ist die Komponente  $q_3 = 0$ , und auf dem Pfad  $\mathcal{C}[\mathbf{q}_B, \mathbf{q}_C]$  ist die Komponente  $q_1 = \text{const}$ . Wegen der gewählten Anfangsbedingungen

liegt die Flugbahn des Teilchens in der Ebene  $q_2 = 0$ . Man erhält dann für das ursprüngliche Wegintegral von  $\mathbf{q}_A$  nach  $\mathbf{q}_B$  eine Summe von zwei einfach zu berechnenden Integralen:

$$\begin{aligned} S(\mathbf{q}_B, \mathbf{q}_A, E, J) &= \int_{\mathcal{C}[\mathbf{q}_B, \mathbf{q}_A]} \langle d\mathbf{q}, \mathbf{p} \rangle \\ &= \int_{\mathcal{C}[\mathbf{q}_B, \mathbf{q}_C]} \langle d\mathbf{q}, \mathbf{p} \rangle + \int_{\mathcal{C}[\mathbf{q}_C, \mathbf{q}_A]} \langle d\mathbf{q}, \mathbf{p} \rangle \\ &= \int_0^{q_{3,B}} dq_3 \cdot p_3 + \int_0^{q_{1,C}} dq_1 \cdot p_1 \end{aligned}$$

Mit der Energie des Systems

$$E = \frac{p_1^2 + p_3^2}{2m} + mgq_3,$$

und der sinnvollen Vorgabe  $0 \leq q_3 \leq q_{3,B}$  finden wir

$$p_3 = \sqrt{2m(E - \frac{p_1^2}{2m} - mgq_3)}$$

Da die Impulskomponente  $p_1$  im vorliegenden Problem Erhaltungsgröße ist, gilt

$$p_1 = \frac{\partial S}{\partial q_1} = p_{1,A}$$

Somit ergibt sich das Wirkungsintegral zu:

$$\begin{aligned} S(\mathbf{q}_B, \mathbf{q}_A, E, J = p_1) &= q_{1,B} p_1 + \int_0^{q_{3,B}} dq_3 \sqrt{2m(E - \frac{p_1^2}{2m} - mgq_3)} \\ &= q_1^{(B)} p_1 + \frac{\left[2m(E - \frac{p_1^2}{2m})\right]^{3/2} - \left[2m(E - \frac{p_1^2}{2m} - mgq_{3,B})\right]^{3/2}}{3m^2 g} \end{aligned}$$

Der Differentialquotient  $\frac{dq_3}{dq_1}$  liefert uns die Informationen, die wir brauchen, um die physikalische Bahnkurve des Teilchens zu berechnen. Dazu schreiben wir

$$\frac{dq_3}{dq_1} = \frac{m \frac{dq_3}{dt}}{m \frac{dq_1}{dt}} = \frac{p_3}{p_1} = \frac{\frac{\partial S}{\partial q_3}}{\frac{\partial S}{\partial q_1}} = \frac{\sqrt{2m(E - \frac{p_1^2}{2m} - mgq_3)}}{p_1}$$

Durch Trennung der Variablen erhält man

$$\int_0^{q_{3,B}} \frac{dq_3}{\sqrt{2m(E - \frac{p_1^2}{2m} - mgq_3)}} = \int_0^{q_{1,B}} \frac{dq_1}{p_1}$$

Das Ergebnis dieser Integration

$$\left(E - \frac{p_1^2}{2m}\right)^{1/2} - \left(E - \frac{p_1^2}{2m} - mgq_{3,B}\right)^{1/2} = mg \sqrt{\frac{m}{2}} \cdot \frac{q_{1,B}}{p_1}$$

können wir nach  $q_{3,B}$  auflösen. Mit den Abkürzungen  $Q_3 = q_{3,B}$  und  $Q_1 = q_{1,B}$  erhalten wir die bekannte Gleichung der Wurfparabel:

$$Q_3 = \frac{v_{3,A}}{v_{1,A}} Q_1 - \frac{g}{2[v_{1,A}]^2} Q_1^2$$

Dabei haben wir verwendet, dass die Energie durch die Geschwindigkeit des Teilchens zum Zeitpunkt  $t = 0$  festgelegt ist:

$$E = \frac{m}{2} (v_{1,A}^2 + v_{3,A}^2) = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{m}{2} v_{1,A}^2$$

Also

$$v_{3,A} = \sqrt{\frac{2}{m} \left[ E - \frac{p_1^2}{2m} \right]}^{1/2}$$

Schließlich berechnen wir die Flugzeit um auf der Wurfparabel von  $\mathbf{q}_A$  nach  $\mathbf{q}_B$  zu kommen:

$$\begin{aligned} t_{AB} &= \frac{\partial S}{\partial E}(\mathbf{q}_B, \mathbf{q}_A, E, J = p_1) \\ &= \int_0^{Q_3} dq_3 \frac{2m}{\sqrt{2m(E - \frac{p_1^2}{2m} - mgq_3)}} \\ &= \frac{2^{1/2}}{gm^{1/2}} \left\{ \left[ E - \frac{p_1^2}{2m} \right]^{1/2} - \left[ E - \frac{p_1^2}{2m} - mgQ_3 \right]^{1/2} \right\} \end{aligned}$$

Nach einigen elementaren Umformungen erhalten wir die bekannte Formel für die Flugzeit eines Projektils auf der Wurfparabel:

$$t_{AB} = \frac{v_{3,A} - \sqrt{[v_{3,A}]^2 - 2gQ_3}}{g}.$$

Der Scheitelpunkt  $(q_{1,S}, q_{3,S})$  der Parabel lässt sich aus der Forderung  $\frac{dq_3(q_1)}{dq_1} = 0$  für  $q_1 = q_1^{(S)}$  bestimmen:

$$\begin{aligned} q_{1,S} &= \frac{v_{1,A} v_{3,A}}{g} \\ q_{3,S} &= \frac{v_{3,A}^2}{2g} \end{aligned}$$

Die Flugzeit vom Punkt  $\mathbf{q}_A$  zum Scheitelpunkt  $\mathbf{q}_S$  der Parabel beträgt

$$t_s = \frac{q_{1,S}}{v_{1,A}} = \frac{v_{3,A} - \sqrt{v_{3,A}^2 - 2gq_{3,S}}}{g} = \frac{v_{3,A}}{g}$$

## 2.4 Rekonstruktion von Trajektorien aus Flächen konstanter Wirkung

Der Impuls  $\mathbf{p} = \vec{\nabla}_q S$  ist orthogonal zur Fläche  $S = \text{const.}$  Bei festgehaltener Anfangsposition  $\mathbf{q}_A$  und vorgegebenen Werten für die Erhaltungsgrößen  $E$  und  $J$  definiert die Relation

$$S(\mathbf{q}, \mathbf{q}_A, E, J) = C$$

eine Fläche im Ortsraum. Die Familie dieser Flächen für verschiedene Werte von  $C$  hat die Eigenschaft, dass die Normalen zu diesen Flächen eine erlaubte Schar dynamischer Trajektorien darstellen, da der Impuls  $\mathbf{p}(t) = m \frac{d}{dt} \mathbf{q}(t)$  tangential zur Bahnkurve  $\mathbf{q}(t)$  orientiert ist. Diese Konstruktion ist völlig analog zur Konstruktion von Kraftfeldern aus Äquipotentialflächen. In der Optik entspricht der Forderung  $S = \text{const.}$  eine Fläche konstanter Phase des elektromagnetischen Feldes und die Normalen zu dieser Fläche entsprechen den Lichtstrahlen.

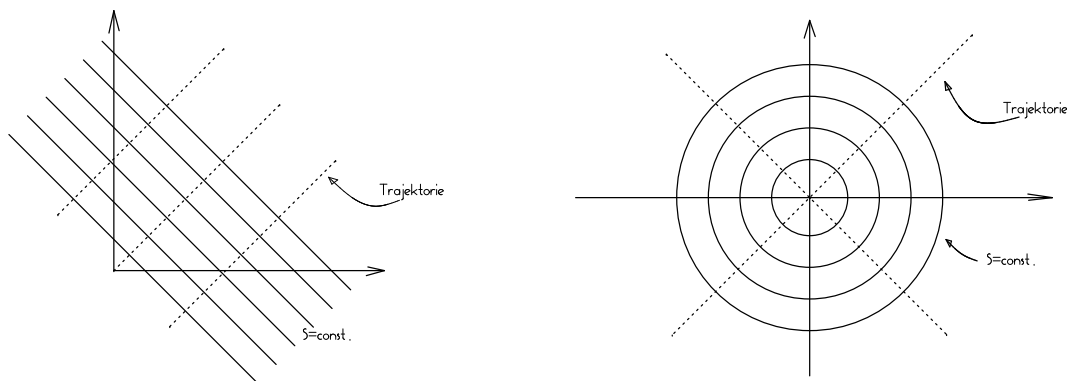


Abbildung 2.2: Flächen konstanter Wirkung und Trajektorien

Die Abbildungen zeigen die Flächen konstanter Wirkung eines freien Teilchens. Die linke Abbildung zeigt Linien konstanter Wirkung  $S$  für die Bewegung eines freien Teilchens mit der Nebenbedingung, dass die Bewegung in der Ebene  $q_2 = 0$  abläuft:

$$S = p_1 q_1 \pm \sqrt{2m(E - \frac{p_1^2}{2m})} \cdot q_3$$

Die rechte Abbildung zeigt die Linien konstanter Wirkung  $S$  für die Bewegung eines freien Teilchens im Raum mit der zusätzlichen Nebenbedingung, dass der Drehimpuls des Teilchens bzgl. des Aufpunkts  $\mathbf{q}^{(A)}$  gleich Null ist:

$$S = \pm \sqrt{2mE} \cdot |\mathbf{q} - \mathbf{q}_A|$$

Die zu den Flächen konstanter Wirkung orthogonalen Strahlen beschreiben mögliche Bahnkurven der Teilchen des Systems.

## Kapitel 3

# Prinzip von Euler-Maupertius

### 3.1 Isoenergetische Variationen

Im allgemeinen Fall gibt es zu vorgegebener Energie  $E = \text{const.}$  und eventuell vorgegebenen weiteren Erhaltungsgrößen  $J = \text{const.}$  mehrere Wege  $\tilde{\mathcal{C}}[\mathbf{q}^{(B)}, \mathbf{q}^{(A)}]$ , die einen vorgegebenen Anfangspunkt  $\mathbf{q}^{(A)}$  mit einem vorgegebenen Endpunkt  $\mathbf{q}^{(B)}$  verbinden. Aber nur auf einem dieser Pfade, der physikalischen Bahnkurve  $\mathcal{C}[\mathbf{q}^{(B)}, \mathbf{q}^{(A)}]$ , erfüllen die Punkte auf der Bahnkurve,  $\mathbf{q}(t)$  und  $\mathbf{p}(t)$ , die Newton'schen Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned}\dot{q}_j(t) &= \frac{p_j(t)}{m} \\ \dot{p}_j(t) &= -\frac{\partial V}{\partial q_j}(q_1, q_2, q_3).\end{aligned}\tag{3.1}$$

Wegen der Energieerhaltung ist die Dynamik des Teilchens auf eine Hyperfläche des Phasenraums eingeschränkt, also

$$E = K + V = \text{const.}$$

mit

$$K = \frac{\langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle}{2m} = \frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m} = \frac{|\mathbf{p}|^2}{2m}$$

$$V = V(q_1, q_2, q_3)$$

Das Bogenelement  $d\mathbf{q} = dt \cdot \frac{d\mathbf{q}}{dt}$  und der Impuls  $\mathbf{p}(t)$  sind auf der physikalischen Bahnkurve  $\mathbf{q}(t)$  zu jedem Zeitpunkt  $t$  kollinear, d.h.

$$\langle d\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t) \rangle = dt \langle \dot{\mathbf{q}}(t), \mathbf{p}(t) \rangle = dt \frac{\langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle}{m} = dt \frac{|\mathbf{p}| |\mathbf{p}|}{m} = dt \cdot \left| \frac{d\mathbf{q}}{dt} \right| \cdot |\mathbf{p}| = |d\mathbf{q}| \cdot |\mathbf{p}|,$$

denn aufgrund der allgemeinen Eigenschaft des Skalarprodukts

$$\langle d\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t) \rangle = |d\mathbf{q}| \cdot |\mathbf{p}| \cos \gamma$$

folgt notwendig

$$\cos \gamma = 1.$$



In Gedanken betrachten wir jetzt eine zur physikalischen Bahn  $\mathcal{C}$  benachbarte Bahnkurve  $\tilde{\mathcal{C}}$ . Ist  $\mathbf{q}(t)$  eine Parametrisierung der physikalischen Bahnkurve  $\mathcal{C}$ , so parametrisieren wir die benachbarte Bahnkurve  $\tilde{\mathcal{C}}$  in der Form

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{q}}(\tilde{t}) &= \mathbf{q}(t) + \varepsilon \boldsymbol{\eta}(t) \\ \tilde{t} &= t + \varepsilon \tau(t).\end{aligned}$$

Eine Standardparametrisierung beliebiger Raumkurven ist immer über die Bogenlänge möglich. Der Parameter einer Raumkurve werde im Folgenden mit  $\tau(t)$  bezeichnet. Auf der physikalischen Bahnkurve  $\mathcal{C}$  ist die Bogenlänge proportional zur abgelaufenen Zeit  $t$ . Dieser Zusammenhang gilt im Allgemeinen nicht mehr für die variierten Bahnkurven  $\tilde{\mathcal{C}}$ .

Wie die physikalische Bahnkurve  $\mathbf{q}(t)$  soll die variierte Bahn  $\tilde{\mathbf{q}}(\tilde{t}(t))$  auf der Energieschale

$$E = \text{const.}$$

im Phasenraum verlaufen und die gleichen Anfangs- und Endpunkte wie die physikalische Bahnkurve besitzen (siehe Abbildung (3.1)).

Entlang der variierten Bahnkurve  $\tilde{\mathbf{q}}(\tilde{t})$  sind der Tangentialvektor  $d\tilde{\mathbf{q}}(\tilde{t})$  und der Impuls  $\tilde{\mathbf{p}}(\tilde{t})$  nicht notwendig kollinear, da  $\tilde{\mathbf{q}}(\tilde{t})$  nicht Lösung der Newton'schen Bewegungsgleichungen 3.1 ist.

Bahnkurven  $\mathcal{C}$  und  $\tilde{\mathcal{C}}$ , auf denen die Energie eines Teilchens den gleichen Wert  $E = \text{const.}$  hat, nennen wir *isoenergetisch*.

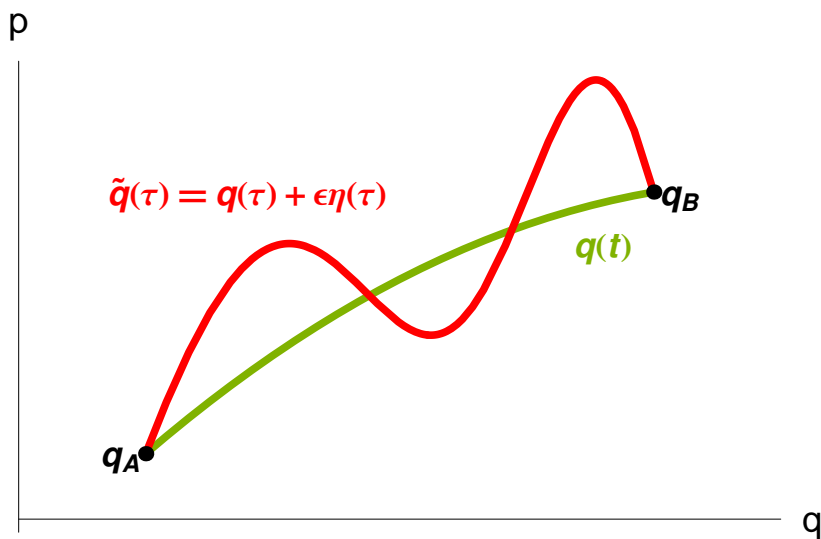


Abbildung 3.1: Physikalische Bahn und isoenergetische Variation derselben

Wir vergleichen jetzt das Wirkungsintegral  $S(\mathbf{q}^{(B)}, \mathbf{q}^{(A)}, E, J)$  auf der physikalischen Bahnkurve  $\mathcal{C}[\mathbf{q}^{(B)}, \mathbf{q}^{(A)}]$  mit dem Wirkungsintegral  $\tilde{S}(\mathbf{q}^{(B)}, \mathbf{q}^{(A)}, E, J)$  auf der variierten Bahnkurve  $\tilde{\mathcal{C}}[\mathbf{q}^{(B)}, \mathbf{q}^{(A)}]$ .

$$S = S(\mathbf{q}^{(B)}, \mathbf{q}^{(A)}, E, J) = \int_{\mathcal{C}} \langle d\mathbf{q}, \mathbf{p} \rangle = \int_{\mathcal{C}} |d\mathbf{q}| \cdot |\mathbf{p}|$$

Auf der benachbarten Bahnkurve gilt, da  $d\tilde{\mathbf{q}}$  und  $\tilde{\mathbf{p}}$  nicht notwendig kollinear sind,

$$\tilde{S} = \tilde{S}(\mathbf{q}^{(B)}, \mathbf{q}^{(A)}, E, J) = \int_{\tilde{\mathcal{C}}} \langle d\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{p}} \rangle = \int_{\tilde{\mathcal{C}}} |d\tilde{\mathbf{q}}| \cdot |\tilde{\mathbf{p}}| \cdot \cos \tilde{\gamma}$$

Ersetzen wir  $\cos \tilde{\gamma}$  auf dem Weg  $\tilde{\mathcal{C}}$  durch sein Maximum, erhalten wir die Ungleichung

$$\tilde{S}(\mathbf{q}^{(B)}, \mathbf{q}^{(A)}, E, J) \leq \int_{\tilde{\mathcal{C}}} |d\tilde{\mathbf{q}}| \cdot |\tilde{\mathbf{p}}|$$

Da das Wirkungsintegral unabhängig vom gewählten Integrationsweg ist, gilt  $\tilde{S} = S$ , und die Ungleichung läßt sich umschreiben zu

$$S \leq \tilde{S}_T,$$

wobei

$$\tilde{S}_T := \int_{\tilde{\mathcal{C}}} |d\tilde{\mathbf{q}}| \cdot |\tilde{\mathbf{p}}|$$

das *trunkierte Wirkungsintegral*<sup>1</sup> ist. Somit gilt

$$S = \int_{\mathcal{C}} |d\mathbf{q}| \cdot |\mathbf{p}| = \min_{\tilde{\mathcal{C}}} \int_{\tilde{\mathcal{C}}} |d\tilde{\mathbf{q}}| \cdot |\tilde{\mathbf{p}}|$$

Unser Ergebnis ist Wirkungsminimierung: Ein Teilchen der Masse  $m$  und Energie

$$E = \frac{|\mathbf{p}|^2}{2m} + V(\mathbf{q})$$

und (eventuell) weiterer Erhaltungsgrößen  $J$  schlägt zwischen einer Anfangsposition  $\mathbf{q}^{(A)}$  und einem vorgegebenen Endpunkt  $\mathbf{q}^{(B)}$  eine derartige Bahnkurve  $\mathcal{C}$  ein, so dass das trunkierte Wirkungsintegral  $\tilde{S}_T$  minimal wird. Dies ist das *Prinzip der minimalen Wirkung* für isoenergetische Variationen nach Jacobi-Euler-Maupertius.

Pierre Louis Maupertuis<sup>2</sup> hatte als Erster die Idee, dass Vorgänge in der Natur immer extremal bzw. optimal ablaufen. Dieser Gedanke wurde maßgeblich von Leonhard Euler<sup>3</sup> und Louis Lagrange<sup>4</sup> in eine mathematische Form gebracht, die wir heute Euler-Lagrange-Gleichungen nennen. Diese werden wir im Kapitel **Lagrange-Formalismus** detailliert behandeln.

Das Prinzip der kleinsten Wirkung hat in der Optik seine Entsprechung in der Formulierung des Fermat'schen Prinzips, welches besagt, dass sich ein Lichtstrahl in einem Medium immer auf der Trajektorie mit der kürzesten Flugzeit bewegt.

Aufgrund der gemachten Voraussetzung, dass die zugelassenen Vergleichsbahnen  $\tilde{\mathbf{q}}(\tilde{t})$  auf der gleichen Energieschale  $E = \text{const.}$  wie die physikalische Bahn  $\mathbf{q}(t)$  liegen, gilt

$$E = \frac{\langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle}{2m} + V(\mathbf{q}) = \frac{\langle \tilde{\mathbf{p}}, \tilde{\mathbf{p}} \rangle}{2m} + V(\tilde{\mathbf{q}}).$$

<sup>1</sup>Im Unterschied zu  $\tilde{S}$  hängt das trunkierte Funktional  $\tilde{S}_T$  vom gewählten Integrationsweg  $\tilde{\mathcal{C}}$  ab!

<sup>2</sup>Pierre Louis Moreau de Maupertuis war ein französischer Mathematiker, Astronom und Philosoph, der als Erster das Prinzip der kleinsten Wirkung formulierte.

<sup>3</sup>Leonhard Euler, einer der bedeutendsten Mathematiker der Geschichte

<sup>4</sup>Joseph Louis Lagrange war ein italienisch-französischer Mathematiker und Astronom.

Somit können wir  $|\tilde{\mathbf{p}}|$  durch die Konstante  $E$  und die Koordinaten  $\tilde{\mathbf{q}}$  ausdrücken:

$$|\tilde{\mathbf{p}}| = \sqrt{2m \cdot (E - V(\tilde{\mathbf{q}}))}$$

Damit ergibt sich das trunkierte Wirkungsintegral als Funktion des kleinen Parameters  $\varepsilon$ , der ein Maß für die Abweichung der Bahn  $\tilde{\mathcal{C}}$  von der physikalischen Bahn  $\mathcal{C}$  ist, zu

$$\tilde{S}_T(\varepsilon) = \int_{\mathbf{q}^{(A)}}^{\mathbf{q}^{(B)}} |d\tilde{\mathbf{q}}| \sqrt{2m \cdot [E - V(\tilde{\mathbf{q}}(\tau))]}.$$

Für  $\varepsilon \rightarrow 0$  stimmen  $\tilde{\mathbf{q}}(\tilde{t})$  und  $\mathbf{q}(t)$  überein und  $\tilde{S}_T(\varepsilon = 0)$  wird zum Minimum. Damit gilt der Zusammenhang für kleine  $\varepsilon$ :

$$\tilde{S}_T(\varepsilon) - \tilde{S}_T(\varepsilon = 0) = o(\varepsilon^2)$$

Das bedeutet, dass die erste Ableitung der Funktion  $\tilde{S}_T(\varepsilon)$  an der Stelle  $\varepsilon = 0$  verschwindet:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} \tilde{S}_T(\varepsilon) = 0$$

Diese Eigenschaft ist die Grundlage der Variationsrechnung, mit deren Hilfe die physikalische Bahn eines Teilchens mit vorgegebener Energie  $E$  bestimmt werden kann!

## 3.2 Bestimmung der physikalischen Bahnkurve aus einem Variationsprinzip

Wir bestimmen jetzt die Flugbahn  $\mathcal{C}$  eines Teilchens der Masse  $m$  unter dem Einfluss einer 1-D konservativen Kraft

$$\mathbf{F}(z) = -\frac{dV}{dz} \hat{\mathbf{e}}_3.$$

Im vorliegenden Fall ist die potentielle Energie

$$V = V(z)$$

translationsinvariant bezüglich der Richtung  $\hat{\mathbf{e}}_1$  und  $\hat{\mathbf{e}}_2$ . Es handelt sich demnach um ein ebenes Problem. Dann ist es vorteilhaft, die physikalische Bahnkurve  $\mathbf{q}(t) = x(t)\hat{\mathbf{e}}_1 + z(t)\hat{\mathbf{e}}_3$  nicht in parametrisierter Form, sondern direkt die Koordinate  $z$  als Funktion der Koordinate  $x$  zu bestimmen.

Wir stellen jetzt die variierte Bahnkurve in der Form

$$\tilde{z}(x) = z(x) + \varepsilon\eta(x)$$

dar. Mit

$$|d\tilde{\mathbf{q}}| = \sqrt{(dx)^2 + (d\tilde{z})^2} = dx \sqrt{1 + \left[ \frac{d\tilde{z}(x)}{dx} \right]^2}$$

erhalten wir das trunkierte Wirkungsintegral zu

$$\begin{aligned} \tilde{S}_T(\varepsilon) &= \int_{x_A}^{x_B} dx \sqrt{1 + \left[ \frac{d\tilde{z}(x)}{dx} \right]^2} \cdot \sqrt{2m(E - V[\tilde{z}(x)])} \\ &= \int_{x_A}^{x_B} dx \sqrt{1 + \left[ \frac{dz(x)}{dx} + \varepsilon \frac{d\eta(x)}{dx} \right]^2} \cdot \sqrt{2m(E - V[z(x) + \varepsilon\eta(x)])} \end{aligned}$$

Die physikalische Bahn  $z(x)$  ist durch die Forderung

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d\tilde{S}_T(\varepsilon)}{d\varepsilon} \stackrel{!}{=} 0$$

implizit festgelegt, da  $\tilde{S}_T(\varepsilon)$  für  $\varepsilon = 0$  ein Minimum annimmt.

Wir berechnen jetzt die erste Ableitung von  $\tilde{S}_T(\varepsilon)$  unter Verwendung der Produktregel und der Kettenregel:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d\tilde{S}_T(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \int_{x_A}^{x_B} dx \sqrt{1 + \left[\frac{dz(x)}{dx}\right]^2} \cdot \sqrt{2m(E - V[z(x)])} \cdot \left[ \frac{\frac{dz(x)}{dx} \frac{d\eta(x)}{dx}}{1 + \left[\frac{dz(x)}{dx}\right]^2} - \frac{\frac{dV[z(x)]}{dz} \cdot \eta(x)}{2(E - V[z(x)])} \right]$$

Um einen Ausdruck zu finden, der unabhängig von der gewählten Abweichung  $\eta(x)$  ist, müssen wir den Term proportional zu  $\frac{d\eta(x)}{dx}$  partiell integrieren. Dies liefert unter Verwendung der Randbedingungen  $\eta(x_A) = 0 = \eta(x_B)$ :

$$= \sqrt{2m} \int_{x_A}^{x_B} dx \left[ -\frac{d}{dx} \left( \sqrt{\frac{E - V[z(x)]}{1 + \left[\frac{dz}{dx}\right]^2}} \cdot \frac{dz(x)}{dx} \right) - \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\frac{1 + \left[\frac{dz}{dx}\right]^2}{E - V[z(x)]}} \cdot \frac{dV[z(x)]}{dz} \right] \cdot \eta(x) \stackrel{!}{=} 0$$

Da die erste Ableitung des trunkierten Wirkungsintegrals  $\tilde{S}_T(\varepsilon)$  an der Stelle  $\varepsilon = 0$  für jede Abweichung  $\eta(x)$  verschwinden muss, ist es hinreichend, dass der Faktor unter dem Integral vor der Funktion  $\eta(x)$  identisch verschwindet. Wir erhalten somit eine Differentialgleichung zur Bestimmung der Flugbahn  $z(x)$ :

$$\frac{d}{dx} \left[ \sqrt{\frac{E - V[z(x)]}{1 + \left[\frac{dz(x)}{dx}\right]^2}} \cdot \frac{dz(x)}{dx} \right] + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1 + \left[\frac{dz(x)}{dx}\right]^2}{E - V[z(x)]}} \cdot \frac{dV[z(x)]}{dz} = 0$$

Multipliziert man diese Gleichung mit dem Faktor

$$f(x) = \sqrt{\frac{E - V[z(x)]}{1 + \left[\frac{dz(x)}{dx}\right]^2}} \frac{dz(x)}{dx}$$

lässt sich der Term glücklicherweise als Ableitung nach  $x$  darstellen:

$$\frac{d}{dx} [[f(x)]^2 + V[z(x)]] = 0$$

Hierbei wurde verwendet:

$$\frac{dV[z(x)]}{dz} \cdot \frac{dz}{dx} = \frac{dV[z(x)]}{dx} \quad \text{und} \quad \frac{d}{dx} [f(x)]^2 = 2 \frac{df(x)}{dx} f(x)$$

Somit folgt mit einer beliebigen Konstanten  $C$

$$[f(x)]^2 + V[z(x)] = C = \text{const}$$

Einsetzen von  $f(x)$  und Auflösen nach  $\frac{dz}{dx}$  ergibt die Differentialgleichung

$$\left[ \frac{dz(x)}{dx} \right]^2 = \frac{C - V[z(x)]}{E - C}$$

Die Konstante  $C$  charakterisiert die Lösungsschar möglicher physikalischer Bahnen mit minimaler Wirkung und kann an die gestellten Randbedingungen bei  $x = x_A$  und  $x = x_B$  angepasst werden.

Für den Spezialfall

$$V(z) = mg \cdot z$$

befindet sich das Teilchen im homogenen Gravitationsfeld der Erde. Dann erhalten wir aus der angegebenen Differentialgleichung für die physikalische Bahn  $z(x)$ :

$$\frac{dz}{dx} = \sqrt{\frac{C - mgz}{E - C}}$$

An der Stelle  $(x_A = 0, z_A = 0)$  sei die Geschwindigkeit des Teilchens zu

$$\mathbf{v}(t = 0) = v_{x_A} \hat{\mathbf{e}}_1 + v_{z_A} \hat{\mathbf{e}}_3$$

vorgegeben. Damit ergibt sich die Energie zu

$$E = \frac{m}{2} (v_{x_A}^2 + v_{z_A}^2)$$

Das Verhältnis der Geschwindigkeiten legt die Konstante  $C$  fest:

$$\frac{v_{z_A}}{v_{x_A}} = \frac{\frac{dz(x)}{dt}}{\frac{dx}{dt}} = \frac{dz}{dx} = \sqrt{\frac{C}{E - C}}$$

Also

$$C = \frac{E \left[ \frac{v_{z_A}}{v_{x_A}} \right]^2}{1 + \left[ \frac{v_{z_A}}{v_{x_A}} \right]^2} = \frac{E v_{z_A}^2}{v_{x_A}^2 + v_{z_A}^2} = \frac{m}{2} v_{z_A}^2$$

Damit ergibt sich die gesuchte Differentialgleichung für die Flugbahn  $z(x)$  zu

$$\frac{dz(x)}{dx} = \sqrt{\frac{v_{z_A}^2 - 2gz(x)}{v_{x_A}^2}}$$

Trennung der Variablen liefert dann

$$\int_0^{z_B} \frac{dz}{\sqrt{v_{z_A}^2 - 2gz}} = \int_0^{x_B} \frac{dx}{v_{x_A}},$$

und schließlich

$$\frac{v_{z_A}}{g} - \frac{1}{g} \sqrt{v_{z_A}^2 - 2gz_B} = \frac{x_B}{v_{x_A}}$$

Nennen wir die Koordinaten des Endpunkts  $Z = z_B$  und  $X = x_B$ , ergibt sich durch Auflösen nach  $Z$  die bekannte Flugbahn einer Wurfparabel:

$$Z = \frac{v_{z_A}}{v_{x_A}} \cdot X - \frac{gX^2}{2v_{x_A}^2}$$

Damit ist gezeigt, dass die Wurfparabel im homogenen Schwerfeld der Erde eine Bahn mit minimaler Wirkung ist. Aber ist die Bahn minimaler Wirkung auch eine Bahn mit minimaler Flugzeit?<sup>5</sup>

### 3.2.1 Brachistochronen Problem

Wir betrachten zwei isoenergetische Bahnkurven  $\mathcal{C}$  und  $\tilde{\mathcal{C}}$  in Gestalt von geeignet gebogenen Drahtstücken auf denen eine Perle (reibungsfrei) gleiten kann. Ist eines der Drahtstücke,  $\mathcal{C}$ , eine Wurfparabel, so ist das Wirkungsintegral für die gleitende Perle minimal. Die Flugzeit der Perle vom Punkt  $\mathbf{q}_A = (0, 0, 0)$  zum Scheitelpunkt  $\mathbf{q}_B = (x_s, 0, z_s)$  der Parabel vergleichen wir jetzt mit der Flugzeit auf einem ungebogenen Drahtstück, das die Punkte  $\mathbf{q}_A$  und  $\mathbf{q}_B$  auf kürzestem Weg verbindet. Die zweite Flugbahn ist also eine Sekante der Parabel.

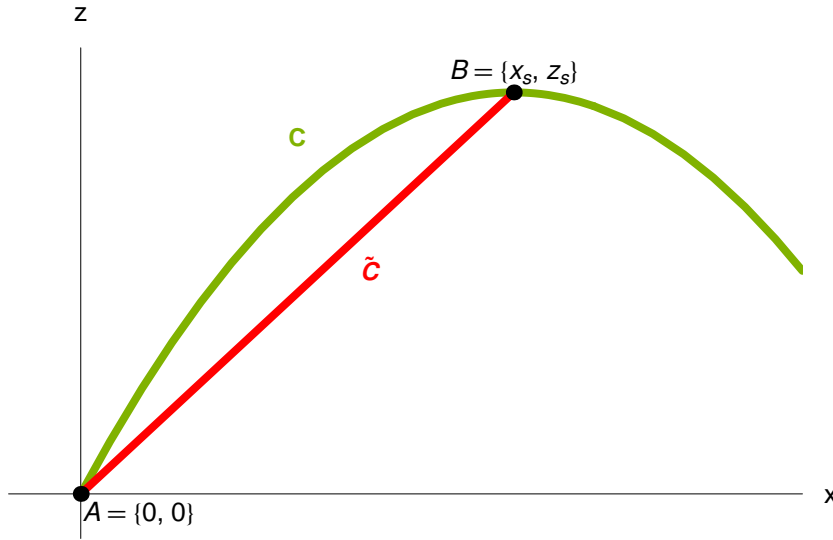


Abbildung 3.2: Wurfparabel

Allgemein gesprochen ist die Flugzeit vom Punkt  $\mathbf{q}_A$  auf einer Bahnkurve  $\tilde{\mathcal{C}}$  zum Endpunkt  $\mathbf{q}_B$  vom betrachteten Weg abhängig. Sie kann als Ableitung des trunkierten Wirkungsintegrals  $\tilde{S}_T = \tilde{S}_T[\mathbf{q}_B, \mathbf{q}_A, E, J]$  nach der Energie  $E$  dargestellt werden:

$$\tilde{t}_{AB} = \frac{\partial \tilde{S}_T}{\partial E} = \frac{\partial}{\partial E} \int_{\tilde{\mathcal{C}}} |d\tilde{\mathbf{q}}| \sqrt{2m [E - V(\tilde{\mathbf{q}})]} = \int_{\tilde{\mathcal{C}}} |d\tilde{\mathbf{q}}| \frac{m}{\sqrt{2m [E - V(\tilde{\mathbf{q}})]}} = \int_{\tilde{\mathcal{C}}} \frac{|d\tilde{\mathbf{q}}|}{|\mathbf{v}|} = \int_{\tilde{\mathcal{C}}} \frac{ds}{v}$$

Diese Formel für die Flugzeit wenden wir jetzt auf den geraden Verbindungsweg zwischen  $\mathbf{q}_A$  und  $\mathbf{q}_B$  an. Da der Abschusswinkel an der Stelle  $\mathbf{q}_A$  auf dem geraden Wegstück  $\tilde{\mathcal{C}}$  flacher ist als auf der Parabel  $\mathcal{C}$ , ist die Richtung der Startgeschwindigkeit  $\tilde{\mathbf{v}}_A$  auf dem geraden Verbindungsweg verglichen mit der Startgeschwindigkeit  $\mathbf{v}_A$  auf der Parabel verschieden, aber wegen

$$E = \frac{m}{2} \left( [\tilde{v}_{x_A}]^2 + [\tilde{v}_{z_A}]^2 \right) = \frac{m}{2} \left( [v_{x_A}]^2 + [v_{z_A}]^2 \right)$$

<sup>5</sup>Unter allen Bahnen mit gleicher Energie  $E = \text{const.}$  bezeichnet man die Bahn kürzester Flugzeit von einem Punkt  $\mathbf{q}_A$  zum  $\mathbf{q}_B$  als *Brachistochrone*.

gilt  $|\tilde{\mathbf{v}}_A| = |\mathbf{v}_A|$ , da beide Wege isoenergetisch sind. Die Flugzeit auf der Sekante bis zum Scheitelpunkt der Parabel ergibt sich zu:

$$\tilde{t}_s = m \int_0^{z_s} \frac{d\tilde{z} \sqrt{1 + \left(\frac{dx}{d\tilde{z}}\right)^2}}{\sqrt{2m \left[ \frac{m}{2} \left( [\tilde{v}_{x_A}]^2 + [\tilde{v}_{z_A}]^2 \right) - mg\tilde{z} \right]}}$$

Auf dem geraden Verbindungsstück ist  $\frac{dx}{dz} = \frac{x_s}{z_s} = 2 \frac{v_{x_A}}{v_{z_A}}$ . Also

$$\tilde{t}_s = \sqrt{1 + 4 \left[ \frac{v_{x_A}}{v_{z_A}} \right]^2} \cdot \frac{1}{g} \left[ \sqrt{[v_{x_A}]^2 + [v_{z_A}]^2} - v_{x_A} \right] < \frac{v_{z_A}}{g} = t_s$$

Die Flugzeit  $\tilde{t}_s$  auf der Verbindungsgeraden von  $(0, 0)$  nach  $(x_s, z_s)$  ist also bei gleicher Energie  $E$  kürzer als die Flugzeit auf der Wurfparabel. Aber ist diese Bahn diejenige mit der kürzesten Flugzeit? Eine Bahn kürzester Flugzeit im Vergleich zu allen anderen isoenergetischen Bahnen nennt man Brachistochrone. Die Frage nach der geometrischen Gestalt der Brachistochrone wurde 1696 von Johann Bernoulli im Rahmen eines Preisausschreibens gestellt. Gelöst haben diese Aufgabe Sir Isaac Newton, der an dem Preisausschreiben anonym teilnahm<sup>6</sup>, Gottfried Leibniz, Guillaume De l'Hospital, Jakob Bernoulli sowie Johann Bernoulli selbst.

Die Preisfrage von Johann Bernoulli: Auf welcher Bahn  $\mathcal{C}$  ist die Flugzeit für einen Massepunkt  $m$ , der sich in einem Potential  $V(\mathbf{q})$  bewegt, am Kürzesten?

Der Einfachheit halber betrachten wir hier eine nur in  $\mathbf{e}_3$ -Richtung wirkende Kraft mit Potential  $V(\mathbf{q}) = V(z)$ .

Die Flugzeit auf einer (beliebigen isoenergetischen) Bahn  $\tilde{z}(x)$  vom Punkt  $z_A = \tilde{z}_A(x)$  zum Punkt  $z_B = \tilde{z}_B(x)$  ergibt sich aufgrund unserer vorherigen Überlegungen zu:

$$t_{AB}[\tilde{z}(x)] = \int_{\mathcal{C}} |d\tilde{\mathbf{q}}| \frac{m}{\sqrt{2m[E - V(\tilde{\mathbf{q}})]}} = \int_{x_A}^{x_B} dx \sqrt{1 + \left[ \frac{d\tilde{z}(x)}{dx} \right]^2} \cdot \frac{m}{\sqrt{2m[E - V[\tilde{z}(x)]]}}$$

Um die Bahnkurve  $z(x)$  mit kürzester Flugzeit, unter der Nebenbedingung  $E = \text{const.}$ , zu finden, setzen wir:

$$\tilde{z}(x) = z(x) + \varepsilon \eta(x)$$

und betrachten die Flugzeit  $t_{AB}$  als Funktion des reellen Parameters  $\varepsilon$ .

$$t_{AB}(\varepsilon) = \int_{x_A}^{x_B} dx \sqrt{1 + \left[ \frac{dz(x)}{dx} + \varepsilon \frac{d\eta(x)}{dx} \right]^2} \cdot \frac{m}{\sqrt{2m[E - V[z(x) + \varepsilon \eta(x)]]}}$$

Dann genügt die Bahnkurve  $z(x)$  mit der kürzesten Flugzeit der notwendigen Bedingung

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} t_{AB} = 0.$$

Dies führt auf die Forderung

<sup>6</sup>Johann Bernoulli soll in diesem Zusammenhang gesagt haben: „Ich erkenne die Pranke des Löwen.“

$$\sqrt{\frac{m}{2}} \int_{x_A}^{x_B} dx \frac{\sqrt{1 + \left[\frac{dz(x)}{dx}\right]^2}}{\sqrt{E - V[z(x)]}} \cdot \left\{ \frac{\frac{dz(x)}{dx} \cdot \frac{d\eta(x)}{dx}}{1 + \left[\frac{dz(x)}{dx}\right]^2} + \frac{\frac{dV[z(x)]}{dz} \eta(x)}{2(E - V[z(x)])} \right\} \stackrel{!}{=} 0$$

Um die gesuchte Brachistochrone  $z(x)$  zu finden, müssen wir den Term proportional  $\frac{d\eta(x)}{dx}$  mittels partieller Integration in einen Term proportional zu  $\eta(x)$  transformieren<sup>7</sup>:

$$\sqrt{\frac{m}{2}} \int_{x_A}^{x_B} dx \left\{ -\frac{d}{dx} \left[ \frac{\frac{dz(x)}{dx}}{\sqrt{E - V[z(x)]} \sqrt{1 + \left[\frac{dz(x)}{dx}\right]^2}} \right] + \sqrt{\frac{1 + \left[\frac{dz(x)}{dx}\right]^2}{E - V[z(x)]}} \frac{\frac{dV[z(x)]}{dz}}{2(E - V[z(x)])} \right\} \eta(x) \stackrel{!}{=} 0$$

Da diese Forderung für beliebige Variationen  $\eta(x)$  gelten soll, muss der von  $z(x)$  abhängige Faktor vor der Funktion  $\eta(x)$  unter dem Integral identisch verschwinden.

$$-\frac{d}{dx} \left[ \frac{\frac{dz(x)}{dx}}{\sqrt{E - V[z(x)]} \sqrt{1 + \left[\frac{dz(x)}{dx}\right]^2}} \right] + \sqrt{\frac{1 + \left[\frac{dz(x)}{dx}\right]^2}{E - V[z(x)]}} \frac{\frac{dV[z(x)]}{dz}}{2(E - V[z(x)])} = 0.$$

Mit Hilfe der Abkürzung

$$G(x) = \frac{\frac{dz(x)}{dx}}{\sqrt{E - V[z(x)]} \sqrt{1 + \left[\frac{dz(x)}{dx}\right]^2}}$$

lässt sich dies umschreiben zu

$$-\frac{d}{dx} G(x) + \sqrt{\frac{1 + \left[\frac{dz(x)}{dx}\right]^2}{E - V[z(x)]}} \frac{\frac{dV[z(x)]}{dz}}{2(E - V[z(x)])} = 0$$

Multiplikation mit  $G(x)$  auf beiden Seiten liefert

$$-G(x) \cdot \frac{dG(x)}{dx} = -\frac{\frac{dV[z(x)]}{dz} \frac{dz(x)}{dx}}{2(E - V[z(x)])^2}$$

und weiter unter Berücksichtigung der Kettenregel

$$= -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} \frac{1}{E - V[z(x)]},$$

Somit ergibt sich die Relation

$$\frac{d}{dx} \left[ \frac{1}{E - V[z(x)]} - [G(x)]^2 \right] = 0$$

Da die Ableitung nach  $x$  verschwindet, ist der Term in der Klammer gleich einer Konstanten  $\frac{1}{C}$ :

$$\frac{1}{E - V[z(x)]} \left( 1 - \frac{\left[\frac{dz(x)}{dx}\right]^2}{1 + \left[\frac{dz(x)}{dx}\right]^2} \right) = \frac{1}{C} = \text{const.}$$

<sup>7</sup>Die Randterme fallen weg, da Anfangs- und Endpunkte fest vorgegeben sind:  $\eta(x_A) = 0 = \eta(x_B)$



Auflösen nach  $\frac{dz}{dx}$  liefert die gesuchte Differentialgleichung zur Bestimmung der Brachistochronen  $z(x)$  im Potential  $V(z)$ :

$$\left[ \frac{dz(x)}{dx} \right]^2 = \frac{C - E + V(z(x))}{E - V[z(x)]}$$

Dies ist eine Schar von Lösungen  $z(x, C)$ , wobei  $C$  ein beliebiger Parameter ist.

Um die Lösung  $z(x)$  dieser Differentialgleichung zu vorgegebenen Randwerten  $(x_A, z_A)$  zu finden, führt die Methode der Trennung der Variablen zum Ziel, in dem wir nicht  $z$  als Funktion von  $x$ , sondern umgekehrt  $x$  als Funktion von  $z$  bestimmen:

$$\int_{x_A}^x dx' = \int_{z_A}^z dz' \sqrt{\frac{E - V(z')}{C - E + V(z')}}$$

Die Konstante  $C$  muss jetzt kompatibel mit den gestellten Randbedingungen gewählt werden. Wir wenden diese Formel an um die Brachistochrone im homogenen Schwerfeld der Erde  $V(z) = mgz$  explizit zu bestimmen.

### 3.2.2 Zykloide

Zur Zeit  $t = 0$  befinde sich ein Massenpunkt  $m$  am Ort  $(x_A, z_A = H)$  in Ruhe. Als Endpunkt betrachten wir den Punkt auf der Bahn  $(x_B = 0, z_B = 0)$  und nehmen an  $x_B < x_A$ . Dann ist die Energie des Teilchens am Startpunkt  $E = mgH$ . Anstatt die Anfangskoordinate  $x_A$  vorzugeben und anschließend aus den bekannten Anfangsdaten den Scharparameter  $C$  zu bestimmen, ist es einfacher  $C$  geeignet zu wählen und dann anschließend den dazu passenden Wert von  $x_A$  zu bestimmen. Wir machen von dieser Freiheit Gebrauch und wählen den Scharparameter als  $C = E$ . Es folgt aus der vorher angegebenen Formel die Koordinate  $x$  als Funktion der Koordinate  $z$

$$x(z) = \int_0^z dz' \sqrt{\frac{mg(H - z')}{mgz'}}$$

Wir substituieren:

$$z' = H \cdot s^2 \text{ mit } 0 \leq z' \leq H$$

und finden

$$x(z) = 2H \int_0^{\sqrt{\frac{z}{H}}} ds \cdot \sqrt{1 - s^2}$$

Mit der Substitution  $s = \sin \phi$  folgt sofort

$$\begin{aligned} &= 2H \cdot \int_0^{\arcsin \sqrt{\frac{z}{H}}} d\phi \cos^2 \phi \\ &= H[\phi + \sin \phi \cdot \cos \phi]_{\phi=0}^{\phi=\arcsin \sqrt{\frac{z}{H}}} \\ &= H \arcsin \sqrt{\frac{z}{H}} + H \sqrt{\frac{z}{H} \left(1 - \frac{z}{H}\right)} \end{aligned}$$

Die Substitution  $z = H \sin^2\left(\frac{\Theta}{2}\right)$  ergibt eine parametrische Darstellung der gesuchten Brachistochrone in Gestalt einer sog. *Zykloide*<sup>8</sup>:

$$x(\Theta) = \frac{H}{2} (\Theta + \sin \Theta)$$

<sup>8</sup>Man stelle sich z.B. die Trajektorie vor, die ein Ventil am Reifen eines vorbeifahrenden Radfahrers beschreibt

$$z(\Theta) = \frac{H}{2} (1 - \cos \Theta)$$

wobei für  $-\pi \leq \Theta \leq \pi$  eine Periode der Zykloide durchlaufen wird.

Für  $\Theta = \pi$  ist  $x(\Theta = \pi) = H \cdot \frac{\pi}{2} = x_A$  und  $z(\Theta = \pi) = H = z_A$ . Damit ist die zuvor unbestimmte Anfangskoordinate  $x_A$  zu  $x_A = H \frac{\pi}{2}$  festgelegt, was unserer Wahl des Scharparameters als  $C = E$  entspricht. Für  $\Theta = 0$  ist  $x(\Theta = 0) = 0 = x_B$  und  $z(\Theta = 0) = 0 = z_B$ , wie es sein muss, gemäß der Wahl unseres Endpunkts.

Nun können wir noch die Zeit berechnen, die ein Massenpunkt  $m$  mit Startenergie

$$E = mgH = \frac{m}{2} (v_{x_A}^2 + v_{z_A}^2)$$

benötigt um vom Anfangspunkt  $(x(0), z(0))$  zu einem Punkt  $(x(\Theta), z(\Theta))$  auf der Zykloide zu gelangen:

$$\begin{aligned} t &= \int_0^\Theta d\theta \sqrt{\left[\frac{dx(\theta)}{d\theta}\right]^2 + \left[\frac{dz(\theta)}{d\theta}\right]^2} \frac{m}{\sqrt{2m[E - mgz(\theta)]}} \\ &= \int_0^\Theta d\theta \sqrt{\left[\frac{H}{2}(1 + \cos \theta)\right]^2 + \left[\frac{H}{2} \cdot \sin \theta\right]^2} \frac{1}{\sqrt{\frac{gH}{2}(1 + \cos \theta)}} \\ &= \sqrt{\frac{H}{2g}} \cdot \Theta \end{aligned}$$

Somit ist der Bahnparameter  $\Theta$  des betrachteten Endpunkts  $(x(\Theta), z(\Theta))$  proportional zur Flugzeit

$$\Theta = \omega t$$

mit  $\omega = \sqrt{\frac{2g}{H}}$ .

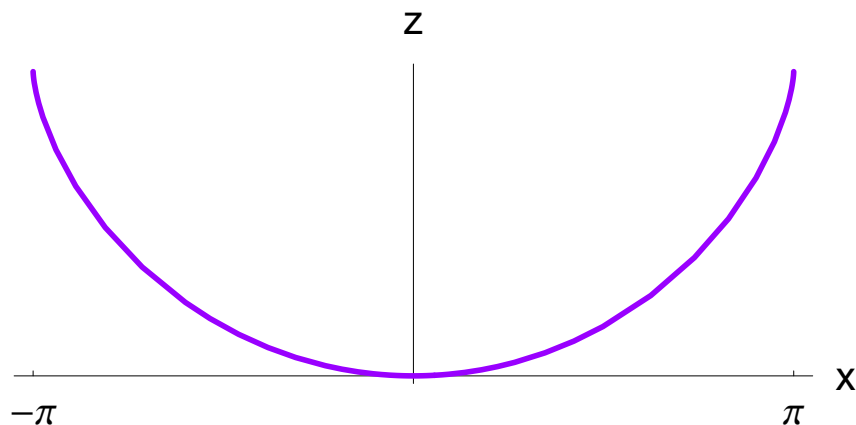


Abbildung 3.3: Zykloide

### 3.2.3 Tautochrone

Auf der Zykloidenbahn des Massenpunkts  $m$  zeigt die Geschwindigkeit in Tangentialrichtung:

$$\begin{aligned}\mathbf{v} &= \frac{d}{dt}x[\Theta(t)]\mathbf{e}_1 + \frac{d}{dt}z[\Theta(t)]\mathbf{e}_3 \\ &= \left[ \frac{dx(\Theta)}{d\Theta}\mathbf{e}_1 + \frac{dz(\Theta)}{d\Theta}\mathbf{e}_3 \right] \cdot \frac{d\Theta}{dt}\end{aligned}$$

wobei  $\Theta$  der Bahnparameter der Kurve ist. Für die Brachistochrone mit

$$\begin{aligned}x(\Theta) &= \frac{H}{2}(\Theta + \sin \Theta) \\ z(\Theta) &= \frac{H}{2}(1 - \cos \Theta) = \frac{H}{4}\sin^2\left(\frac{\Theta}{2}\right)\end{aligned}$$

ergibt sich damit der Tangentialvektor zu

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{v}}_{\Theta} &= \frac{\mathbf{v}(\Theta)}{|\mathbf{v}(\Theta)|} = \frac{\frac{dx(\Theta)}{d\Theta}\mathbf{e}_1 + \frac{dz(\Theta)}{d\Theta}\mathbf{e}_3}{\sqrt{\left[\frac{dx(\Theta)}{d\Theta}\right]^2 + \left[\frac{dz(\Theta)}{d\Theta}\right]^2}} \\ &= \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right)\mathbf{e}_1 + \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right)\mathbf{e}_3\end{aligned}$$

Die Komponente der Gravitationskraft  $\mathbf{F} = -mg\mathbf{e}_3$  entlang der Tangentialrichtung der Bahnkurve ist somit das Skalarprodukt

$$\langle \mathbf{F}, \hat{\mathbf{v}}_{\Theta} \rangle = -mg\langle \mathbf{e}_3, \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right)\mathbf{e}_1 + \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right)\mathbf{e}_3 \rangle = -mg\sin\left(\frac{\Theta}{2}\right)$$

Wir berechnen jetzt die Bogenlänge:

$$\begin{aligned}s(\Theta) &= \int_0^{\Theta} d\theta \sqrt{\left[\frac{dx(\theta)}{d\theta}\right]^2 + \left[\frac{dz(\theta)}{d\theta}\right]^2} \\ &= \frac{H}{2} \int_0^{\Theta} d\theta \sqrt{2(1 + \cos \theta)} = 2H \sin \frac{\Theta}{2}\end{aligned}$$

Somit ist die Tangentialkomponente der Schwerkraft proportional zur Bogenlänge:

$$-mg\sin\frac{\Theta}{2} = -\frac{mg}{2H}s[\Theta(t)]$$

Die Beschleunigung in Tangentialrichtung  $\frac{d^2s[\Theta(t)]}{dt^2}$  ist somit proportional zur wirkenden Tangentialkraft:

$$m\frac{d^2s[\Theta(t)]}{dt^2} = \langle \mathbf{F}, \hat{\mathbf{v}}_{\Theta} \rangle = -\frac{mg}{2H}s[\Theta(t)]$$

Diese Differentialgleichung ist diejenige eines harmonischen Oszillators mit der Frequenz  $f$ , wobei

$$\frac{2\pi}{T} = 2\pi f = \omega = \sqrt{\frac{g}{2H}}$$

Damit ist gezeigt, dass die Periode eines sich hin- und herbewegenden Massenpunktes auf einer Zykloidenbahn vom gewählten Startpunkt völlig unabhängig ist! Die Brachistochrone im homogenen Schwerefeld der Erde ist somit auch eine Tautochrone, denn eine freie Bewegung auf einer Tautochrone dauert immer gleich lange, egal wo man startet.

[Christiaan Huygens](#) hat 1673 ein zykloidisches Pendel zu diesem Problem entworfen. Huygens untersuchte die Zykloide im Rahmen seiner Arbeiten über Uhren. Genaue Uhren hatten damals für die Seefahrt eine besondere Bedeutung bei der Navigation. Huygens konstruierte ein Fadenpendel, dessen Schwingungsdauer auch für große Auslenkungen nur von der Fadenlänge  $l$  abhängt. Dazu ließ Huygens das Pendel nicht frei schwingen, sondern schränkte den Bewegungsraum des Fadens durch zykloidenförmige Begrenzungen ein. Die Trajektorie der am Faden aufgehängten Pendelmasse ist tatsächlich auch ein Zykloidenbogen.

## Kapitel 4

# Lagrange-Formalismus

### 4.1 Vorbemerkungen

Die Newton'schen Bewegungsgleichungen beschreiben die Kinematik wechselwirkender Teilchen unter dem Einfluss von gegebenen Kräften und Zwangskräften (z.B. geometrische Nebenbedingungen). Oft kann durch Wahl geeigneter Lagekoordinaten die durch Zwangskräfte entstehende Einschränkung der Dynamik eines Systems auf einen Unterraum explizit parametrisiert werden. Die Wahl geeigneter Lagekoordinaten (z.B. Zylinder-Koordinaten, Kugel-Koordinaten usw.) ist dabei das Mittel der Wahl, aber sie ist nicht eindeutig und erfolgt vor allem unter dem Gesichtspunkt maximaler Einfachheit! Der Lagrange-Formalismus ist eine 1788 von dem französisch-italienischen Physiker und Mathematiker Joseph Louis Lagrange eingeführte neue Formulierung der klassischen Newton'schen Mechanik. Lagrange ebnete mit seiner Methode den Weg zu einer effizienteren Beschreibung mechanischer Systeme, denn die Aufstellung der Newton'schen Bewegungsgleichungen in Gegenwart von geometrischen Nebenbedingungen sowie die explizite Berechnung der wirkenden Zwangskräfte wird durch den Lagrange-Formalismus erheblich vereinfacht. Der Lagrange-Formalismus verwendet als zentralen Begriff  $\mathcal{L} = K - V$ , die Differenz aus kinetischer Energie  $K$  und potentieller Energie  $V$  der Teilchen des Systems. Dabei ist die kinetische Energie  $K$  ein Maß für die mittlere Geschwindigkeit der Teilchen, während die potentielle Energie  $V$  ein Maß für die geometrische Anordnung der Teilchen im Systems darstellt. Oft kann durch simple Inspektion der Lagrangefunktion unmittelbar festgestellt werden, ob eine physikalische Größe bei einem gegebenen dynamischen Problem eine Erhaltungsgröße ist.

### 4.2 Zwangsbedingungen und Prinzip von d'Alembert

Zwangsbedingungen bewirken eine Einschränkung der Freiheitsgrade eines Systems auf einen Unterraum. Zwangsbedingungen werden dadurch eingehalten, dass man sich das Wirken sog. Zwangskräfte vorstellt.

Eine Straßenbahn bildet z.B. zusammen mit den Gleisen, auf denen sie fährt, ein gekoppeltes System. In der Tat geben die Gleise etwas nach, wenn die Straßenbahn vorbeifährt. Die wirkenden Zwangskräfte kann man anschaulich verstehen, indem man zunächst die Kopplung der Freiheitsgrade des Systems Straßenbahn an die Freiheitsgrade des Systems Gleise über (harmonische) Federkräfte betrachtet. Ist die Frequenz dieser harmonischen Oszillatoren sehr klein im Vergleich zu den charakteristischen Frequenzen der Räder der Straßenbahn, so entkoppeln die Systeme in zwei Untersysteme: die Schiene, als das die Zwangskraft ausübende System, und die Straßenbahn, als das System mit den eingeschränkten Freiheitsgraden. Wenn man schließ-

lich idealisierend zum Limes unendlich großer Federkonstanten übergeht, geben die Gleise gar nicht mehr nach und sind perfekt starr. Im Endergebnis üben die Gleise jetzt Zwangskräfte auf die fahrende Straßenbahn aus, die die Straßenbahn davon abhalten, z.B. neben den Gleisen zu fahren. Solche Zwangskräfte leisten keine Arbeit. Das gilt natürlich nicht mehr, wenn die charakteristischen Frequenzen beider Untersysteme vergleichbar sind und die Systeme stark koppeln. Dann kann die Straßenbahn ohne weiteres die Gleise ausschlagen oder verbiegen.

Ein mechanisches System bestehend aus einer Anzahl  $N$  von Teilchen, die sich in  $D = 3$  räumlichen Dimensionen bewegen, hat (wie schon im ersten Kapitel festgestellt)  $3N$  Positionskordinaten und  $3N$  Impulskordinaten. Bei Berücksichtigung einer Anzahl von  $N_Z$  Zwangsbedingungen ergibt sich eine reduzierte Anzahl  $M = 3N - N_Z$  von Freiheitsgraden, die z.B. für die Beschreibung der Position der Teilchen im Ortsraum dienen können. So können sich die Gasteilchen in einem Behälter nicht vollständig frei bewegen, sondern prallen immer wieder gegen die Wände des Behälters, sie sind also in ihrer Bewegungsfreiheit auf das zur Verfügung stehende Volumen des Behälters eingeschränkt.

Zwangsbedingungen lassen sich in Klassen einteilen. Allgemein unterscheidet man hierbei sog. *holonome* (griechisch für „ganz gesetzlich“) und *anholonome* (d.h. nicht holonome) Zwangsbedingungen.

Holonome Zwangsbedingungen sind für  $1 \leq l \leq L$  charakterisiert durch Gleichungen der Gestalt

$$f_l(q_1, q_2, \dots, q_L, t) = 0$$

Sie sind also nur abhängig von den verallgemeinerten Lagekoordinaten  $q_j$  des Systems und der Zeit  $t$ . Oft kann eine holonome Zwangsbedingung durch Wahl geschickter Koordinatensysteme automatisch berücksichtigt werden. Das ebene Fadenpendel mit einer (masselosen) Schnur der Länge  $\ell$ , an deren Ende ein Massenpunkt  $m$  positioniert ist, ist ein System mit ursprünglich drei Freiheitsgraden. Das Wirken von zwei Zwangsbedingungen, nämlich einmal die Forderung der Konstanz der Länge  $\ell$  des Fadens, und zum anderen die Einschränkung der Bewegung des Pendels auf eine Ebene, reduziert die drei Freiheitsgrade effektiv auf einen einzigen Freiheitsgrad, nämlich den instantanen Auslenkungswinkel  $\phi(t)$  des Pendels aus der Ruhelage. Offensichtlich sind für dieses System ebene Polarkoordinaten am Besten geeignet.

In (älteren) Lehrbüchern der Mechanik teilt man holonome Zwangsbedingungen noch in „*skleronome*“ und „*rheonome*“ Zwangsbedingungen ein. Ein fester Aufhängepunkt des Pendels stellt zum Beispiel eine skleronome Bedingung dar, während eine variable zeitlich veränderliche Aufhängung des Pendels eine rheonome Bedingung darstellt.

Anholonome Zwangsbedingungen sind *nicht* holonome Zwangsbedingungen. Das sind z.B. Nebenbedingungen

$$f_l(q_1, q_2, \dots, q_L, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_L, t) = 0$$

die insbesondere noch von den verallgemeinerten Geschwindigkeiten  $\dot{q}_j$  der Teilchen des Systems abhängig sind. Oft ist die Kenntnis der funktionalen Abhängigkeit zwischen den verallgemeinerten Lagekoordinaten  $q_j$  und verallgemeinerten Geschwindigkeiten  $\dot{q}_j$ , die eine anholonome Nebenbedingung definieren, nicht einmal als explizite Formel bekannt, sondern nur implizit als Differentialgleichung (oder als Pfaffsche Form) vorgegeben, die dann zugleich mit den Lagrange'schen Bewegungsgleichungen für die Teilchen des Systems zu lösen ist. Anholonome Zwangsbedingungen können insbesondere auch als Ungleichungen formuliert sein.

Ein (nicht ganz) einfaches Beispiel für eine differentielle anholonome Zwangsbedingung ist ein Rad, das reibungsfrei und ohne Schlupf auf der Ebene  $z = 0$  abrollt, wobei  $ds = \sqrt{(dx)^2 + (dy)^2}$  ein Bogenelement der Bahnkurve des Rades ist. Das System hat zwei Freiheitsgrade. Die

Zwangsbedingung „Rollen“ auf der Ebene lautet für ein Rad mit Radius  $R$  offensichtlich

$$ds = R d\varphi$$

Diese Zwangsbedingung ist anholonom, denn sie kann nur in differentieller Form angegeben werden. Um den Winkel  $\varphi(t)$  zu kennen, muss die Lösung der Bewegungsgleichung für den Schwerpunkt des Rades bereits bekannt sein. Es ist nämlich durchaus möglich, dass ein rollendes Rad einen Fixpunkt  $P$  der Ebene wiederholt berührt, aber der Berührungspunkt des Rades mit dem Punkt  $P$  bei der ersten Berührung ein Punkt  $Q$ , bei der zweiten Berührung ein anderer Punkt  $Q'$  usw. auf der Peripherie des Rades ist. Die Punkte des rollenden Rades können somit nicht aus dem Problem durch Integration der Nebenbedingung eliminiert werden. Es hängt von der 'Rollgeschichte' des Rades ab, ob der Punkt  $Q$  oder der Punkt  $Q'$  auf der Peripherie des Rades mit dem Punkt  $P$  der Ebene zur Deckung kommt! Für weiterführende Diskussionen zu anholonomen Nebenbedingungen verweisen wir auf die Literatur (z.B. [Goldstein u. a. \(2002\)](#), [Whittaker \(1937\)](#) und [Gantmakher \(1960/1970\)](#)).

Viele geometrische Nebenbedingungen, die man den Freiheitsgraden eines mechanischen Systems auferlegt, lassen sich als das Resultat des Wirkens sog. *Zwangskräfte*  $\mathbf{Z}$  auffassen, die neben den an dem System angreifenden Kräften  $\mathbf{F}$  zusätzlich auf das System einwirken.

Wir betrachten jetzt ein System mit einer Anzahl  $N$  von Teilchen und verwenden kartesische Koordinaten. Der Impuls  $\mathbf{p}_j(t) = m_j \frac{d\mathbf{r}_j}{dt}$  des  $j$ -ten Teilchens am Ort  $\mathbf{r}_j$ , das solchen Zwangskräften unterliegt, ändert sich dann gemäß der Newton'schen Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt}\mathbf{p}_j = \mathbf{F}_j + \mathbf{Z}_j,$$

d.h. es ist  $\mathbf{F}_j + \mathbf{Z}_j$  die wirkende Kraft, die das Teilchen beschleunigt!

Die „Fadenkraft“, die den Massenpunkt des ebenen mathematischen Pendels auf seiner Bahn hält, ist ein Beispiel für eine solche Zwangskraft. Neben der Schwerkraft  $\mathbf{F} = -mg\mathbf{e}_3$  wirkt noch eine Zwangskraft  $\mathbf{Z}$  auf den Massenpunkt, die durch den gespannten Faden übertragen wird, und die instantan in Richtung des Fadens orientiert ist

Die resultierende Kraft setzt sich aus Schwerkraft und Zwangskraft zusammen und führt zu dem bekannten Ergebnis, dass die Trajektorie des Massenpunktes beim ebenen mathematischen Pendel eine Kreisbahn beschreibt.

Wir betrachten als nächstes zwei Massen  $m_1$  und  $m_2$ , die durch einen (masselosen) starren Stab der Länge  $L$  verbunden sind:

Die Zwangsbedingung in diesem System ist

$$|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2 = L^2 = \text{const.}$$

Es gilt also für eine kleine Verrückung  $\delta\mathbf{r}$  des Systems:

$$\langle \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \delta\mathbf{r}_1 - \delta\mathbf{r}_2 \rangle = 0$$

Die Zwangskräfte  $\mathbf{Z}_1$  und  $\mathbf{Z}_2$  sind entlang des Stabes orientiert, d.h. sie sind kollinear mit dem Differenzvektor  $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ . Also ist

$$\mathbf{Z}_1 = -\mathbf{Z}_2$$

und damit

$$\langle \mathbf{Z}_1, \delta\mathbf{r}_1 \rangle + \langle \mathbf{Z}_2, \delta\mathbf{r}_2 \rangle = 0$$

Der Schweizer Mathematiker Johann Bernoulli hat 1717 das Prinzip der *virtuellen Verrückungen* vorgeschlagen. Darunter versteht er eine gedachte Lageänderung  $\delta\mathbf{r}_j$  des  $j$ -ten Teilchens an der

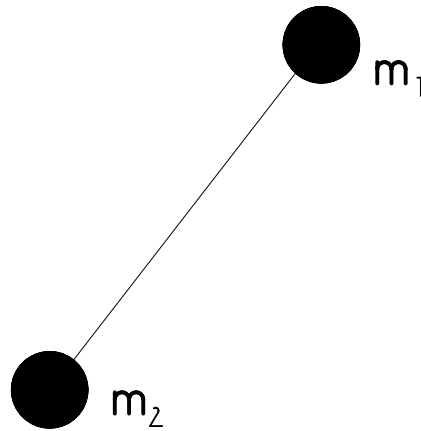


Abbildung 4.1: Stab mit einer Masse an jedem Ende

Position  $\mathbf{r}_j$ , die orthogonal zur auf dieses Teilchen wirkenden Zwangskraft  $\mathbf{Z}_j$  zur Zeit  $t$  ist (ohne Berücksichtigung der tatsächlichen Dynamik). Mathematisch gesehen bedeutet dies, daß eine virtuelle Verrückung tangential zu der von der Zwangskraft definierten Hyperfläche erfolgt, während die Zwangskraft selbst normal auf dieser Fläche steht. Das Skalarprodukt ist demnach immer null:

$$\sum_{j=1}^N \langle \mathbf{Z}_j, \delta \mathbf{r}_j \rangle = 0,$$

Eine virtuelle Verrückung hat keinen Einfluss auf die geleistete Arbeit des Systems. Davon ausgehend führte 1743 Jean-Baptiste le Rond, genannt d'Alembert, das sog. d'Alembert'sche Prinzip der Mechanik ein:

$$\sum_{j=1}^N \left\langle \frac{d}{dt} \mathbf{p}_j - \mathbf{F}_j, \delta \mathbf{r}_j \right\rangle = 0$$

Es stellt sich hier die Frage, ob Zwangskräfte Arbeit leisten? Wir betrachten dazu ein konservatives System mit Gesamtenergie

$$E = K + V = \sum_{j=1}^N \frac{\langle \mathbf{p}_j, \mathbf{p}_j \rangle}{2m_j} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (4.1)$$

Unter Beachtung von  $\mathbf{v}_j = \frac{d}{dt} \mathbf{r}_j$  und  $\mathbf{p}_j = m \mathbf{v}_j$  folgt für die totale Ableitung von (4.1) nach der Zeit:

$$\begin{aligned} \dot{E} &= \frac{dE}{dt} = \sum_{j=1}^N \frac{1}{m_j} \left\langle \mathbf{p}_j, \frac{d}{dt} \mathbf{p}_j \right\rangle + \sum_{j=1}^N \left\langle \nabla_{\mathbf{r}_j} V, \frac{d}{dt} \mathbf{r}_j \right\rangle \\ &= \sum_{j=1}^N \left( \left\langle \mathbf{v}_j, \frac{d}{dt} \mathbf{p}_j \right\rangle - \langle \mathbf{F}_j, \mathbf{v}_j \rangle \right) \\ &= \sum_{j=1}^N \left\langle \frac{d}{dt} \mathbf{p}_j - \mathbf{F}_j, \mathbf{v}_j \right\rangle = 0 \end{aligned}$$



Damit erhalten wir durch Trennung der Variablen

$$\begin{aligned} dE = \dot{E}dt &= \sum_{j=1}^N \left\langle \underbrace{\frac{d}{dt}\mathbf{p}_j - \mathbf{F}_j}_{\equiv \mathbf{Z}_j}, \underbrace{\mathbf{v}_j dt}_{\equiv d\mathbf{r}_j} \right\rangle \\ &= \sum_{j=1}^N \langle \mathbf{Z}_j, d\mathbf{r}_j \rangle \end{aligned}$$

Die Antwort auf die oben gestellte Frage ist folgende: für eine skleronome Zwangsbedingung erhält man

$$\delta\mathbf{r}_j = d\mathbf{r}_j$$

und für eine rheonome Zwangsbedingung:

$$d\mathbf{r}_j = \mathbf{v}_j dt \neq \delta\mathbf{r}_j.$$

Das heißt also, dass Zwangskräfte skleronomer Nebenbedingungen grundsätzlich keine Arbeit am System leisten:  $dE = 0$ . Zwangskräfte rheonomer Nebenbedingungen können durchaus am System Arbeit leisten, wobei Energie zugeführt oder abgeführt werden kann.

Anstatt kartesische Koordinaten zusammen mit skleronomen Nebenbedingungen als Grundlage der Betrachtungen zu nehmen, ist es oft zweckmäßig, die Koordinaten eines Systems aus einem Satz verallgemeinerter Lagekoordinaten

$$q_1, q_2, \dots, q_M \text{ mit } M = 3N - N_Z$$

zu wählen, die die skleronomen Nebenbedingungen automatisch berücksichtigen. Im Fall des ebenen mathematischen Pendels sind dies die bereits vorgestellten Polar-Koordinaten.

Die Zahl  $M = 3N - N_Z$  der tatsächlichen Freiheitsgrade eines Systems ergibt sich aus der Anzahl  $N$  der Massepunkte, die in  $D = 3$  räumlichen Dimensionen jeweils drei Freiheitsgrade besitzen. Dann zieht man  $N_Z$ , die Anzahl der Zwangsbedingungen, wieder ab. Die ursprünglichen kartesischen Koordinaten des Systems sind nun Funktionen der verallgemeinerten Lagekoordinaten:

$$\mathbf{r}_j = \mathbf{r}_j(q_1, q_2, \dots, q_M, t)$$

Man bezeichnet  $q_m$  als generalisierte Lagekoordinate und  $\dot{q}_m$  als generalisierte Geschwindigkeit.

### 4.3 Lagrangefunktion und Bewegungsgleichungen

Aus der Transformationsgleichung, mittels der wir die ursprünglichen Kartesischen Koordinaten durch die verallgemeinerten Lagekoordinaten ausdrücken,

$$\mathbf{r}_j = \mathbf{r}_j(q_1, q_2, \dots, q_M, t) \tag{4.2}$$

folgt für eine virtuelle Verrückung

$$\delta\mathbf{r}_j = \sum_{i=1}^M \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} \delta q_i$$

Mit Hilfe des Prinzips von d'Alembert erhält man

$$\begin{aligned}
0 &= \sum_{j=1}^N \left\langle \frac{d}{dt} \mathbf{p}_j - \mathbf{F}_j, \delta \mathbf{r}_j \right\rangle \\
&= \sum_{j=1}^N \left\langle \frac{d}{dt} \mathbf{p}_j - \mathbf{F}_j, \sum_{i=1}^M \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} \right\rangle \delta q_i \\
&= \sum_{i=1}^M \left[ \sum_{j=1}^N \left\langle \frac{d}{dt} \mathbf{p}_j - \mathbf{F}_j, \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} \right\rangle \right] \delta q_i
\end{aligned}$$

Da die  $q_i$  unabhängig voneinander variiert werden, gilt nach dem Satz vom Nullprodukt notwendig für  $i = 1, 2, \dots, M$ :

$$\sum_{j=1}^N \left\langle \frac{d}{dt} \mathbf{p}_j - \mathbf{F}_j, \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} \right\rangle = 0$$

Im Falle konservativer Systeme lassen sich alle Kräfte aus einem Potential ableiten, das von den Ortskoordinaten und der Zeit abhängig ist, es gilt also

$$\mathbf{F}_j = -\nabla_{\mathbf{r}_j} V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t).$$

Aus (4.2) folgt dann

$$\begin{aligned}
&\sum_{j=1}^N \left\langle \mathbf{F}_j, \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_k} \right\rangle \\
&= -\sum_{j=1}^N \left\langle \nabla_{\mathbf{r}_j} V, \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_k} \right\rangle \\
&= -\frac{\partial}{\partial q_k} V[\mathbf{r}_1(q_1, q_2, \dots, q_M, t), \mathbf{r}_2(q_1, q_2, \dots, q_M, t), \dots] \\
&= f_k
\end{aligned} \tag{4.3}$$

Die potentielle Energie  $V$  ist eine Funktion der verallgemeinerten Lagekoordinaten  $q_1, q_2, \dots, q_M$ . Die Größe  $f_k$  ist eine sog. verallgemeinerte Kraft. Die Betrachtung verdeutlicht, dass eine verallgemeinerte Kraft  $f_k$  nicht notwendig die physikalische Einheit einer Kraft haben muss. Beispielsweise hat die verallgemeinerte Kraft bezüglich eines Freiheitsgrads  $q_k$  mit der Bedeutung eines Winkels die Einheit eines Drehmoments.

Es folgt nach dem Gesagten:

$$f_k = \sum_{j=1}^N \left\langle \mathbf{F}_j, \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_k} \right\rangle = \sum_{j=1}^N \left\langle \frac{d}{dt} \mathbf{p}_j, \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_k} \right\rangle \tag{4.4}$$

$$= \sum_{j=1}^N \left( \frac{d}{dt} \left( \left\langle \mathbf{p}_j, \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_k} \right\rangle \right) - \left\langle \mathbf{p}_j, \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_k} \right) \right\rangle \right) \tag{4.5}$$

$$= \sum_{j=1}^N \left( \frac{d}{dt} \left( \left\langle m_j \frac{d}{dt} \mathbf{r}_j, \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_k} \right\rangle \right) - \left\langle m_j \frac{d\mathbf{r}_j}{dt}, \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_k} \right) \right\rangle \right) \tag{4.6}$$

Über die Kettenregel ergibt sich:

$$\dot{\mathbf{r}}_j = \frac{d\mathbf{r}_j}{dt} = \sum_{m=1}^M \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_m} \dot{q}_m + \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial t}$$

Offensichtlich hängt  $\dot{\mathbf{r}}_j$  nur linear von den verallgemeinerten Geschwindigkeiten  $\dot{q}_k$  ab, da die kartesischen Lagekoordinaten  $\mathbf{r}_j$  nur von den verallgemeinerten Koordinaten  $q_k$ , aber nicht von den verallgemeinerten Geschwindigkeiten  $\dot{q}_k$  abhängig sind. Somit folgt

$$\frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_j}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_k}$$

Aufgrund der vorausgesetzten Vertauschbarkeit der partiellen Ableitung folgern wir unschwer:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_k} \right) &= \sum_m \frac{\partial}{\partial q_m} \left( \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_k} \right) \dot{q}_m + \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_k} \right) \\ &= \sum_m \frac{\partial}{\partial q_k} \left( \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_m} \right) \dot{q}_m + \frac{\partial}{\partial q_k} \left( \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial t} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial q_k} \left( \sum_m \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_m} \dot{q}_m + \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial t} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial q_k} \left( \frac{d\mathbf{r}_j}{dt} \right) \\ &= \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_j}{\partial \dot{q}_k} \end{aligned}$$

Damit ergibt sich durch Einsetzen in (4.6):

$$\begin{aligned} f_k &= -\frac{\partial V}{\partial q_k} = \sum_{j=1}^N \left( \frac{d}{dt} \left( \left\langle m_j \dot{\mathbf{r}}_j, \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_j}{\partial \dot{q}_k} \right\rangle \right) - \left\langle m_j \dot{\mathbf{r}}_j, \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_j}{\partial q_k} \right\rangle \right) \\ &= \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial}{\partial \dot{q}_k} K \right) - \frac{\partial}{\partial q_k} K, \end{aligned}$$

wobei die kinetische Energie

$$K = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{2} \langle \dot{\mathbf{r}}_j, \dot{\mathbf{r}}_j \rangle$$

nummehr über die Geschwindigkeiten  $\dot{\mathbf{r}}_j$  explizit von den generalisierten Koordinaten  $q_k$  und den generalisierten Geschwindigkeiten  $\dot{q}_k$  abhängt!

Da in der Herleitung nur konservative Systeme betrachtet wurden, deren Potentiale  $V = V(q, t)$  unabhängig von den generalisierten Geschwindigkeiten sind, dürfen wir unter Beachtung von  $f_k = -\frac{\partial V}{\partial q_k}$  jetzt schreiben:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial}{\partial \dot{q}_k} (K - V) \right) - \frac{\partial}{\partial q_k} (K - V) = 0$$

Dies sind für  $k = 1, \dots, M$  die Lagrange'schen Bewegungsgleichungen:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} = 0 \quad (4.7)$$

Die Funktion  $\mathcal{L} = \mathcal{L}(q, \dot{q}, t) = K - V$  heißt Lagrangefunktion.

### Beispiel - Ebenes mathematisches Pendel

Es bietet sich an, als generalisierte Koordinaten Polarkoordinaten<sup>1</sup> zu wählen, um das System vollständig zu beschreiben.

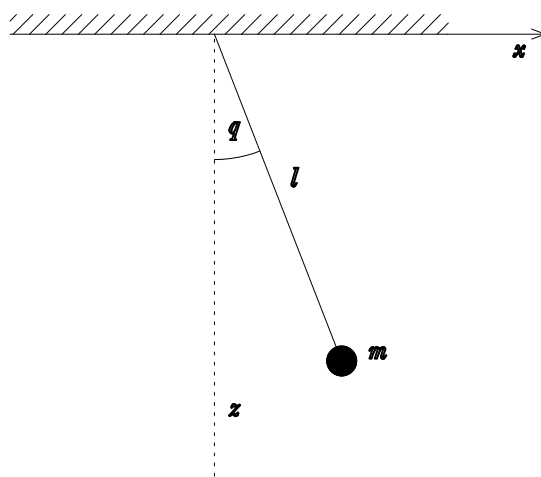


Abbildung 4.2: Fadenpendel

$$\begin{aligned}x(t) &= \ell \sin \varphi(t) \\y(t) &= 0 \\z(t) &= -\ell \cos \varphi(t)\end{aligned}$$

Für ein Bogenelement der Trajektorie des Massenpunktes (Kreisbahn) gilt  $ds = \ell \cdot d\varphi$ , wobei  $\varphi(t)$  der Auslenkungswinkel aus der Ruhelage des Pendels ist. Um die kinetische Energie

$$K = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{z}^2)$$

in Polarkoordinaten auszudrücken, berechnen wir zunächst:

$$\begin{aligned}\dot{z}(t) &= \ell \dot{\varphi} \sin \varphi(t) \\ \dot{x}(t) &= \ell \dot{\varphi} \cos \varphi(t)\end{aligned}$$

Das Potential hat für  $\varphi = 0$  ein Minimum:

$$V(\varphi) = mg(\ell + z) = mg\ell(1 - \cos \varphi)$$

Die Lagrangefunktion des Systems, also die Differenz aus kinetischer Energie und potentieller Energie, ergibt sich zu

$$\mathcal{L} = K - V = \frac{m}{2}\ell^2\dot{\varphi}^2(t) - mg\ell(1 - \cos \varphi)$$

<sup>1</sup>Im vorliegenden Fall nehmen wir an, dass das Pendel in der Ebene  $y = 0$  schwingt.

Die Bewegungsgleichung des mathematischen Pendels in Polarkoordinaten lautet somit

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} \\ &= \frac{d}{dt} (m\ell^2 \dot{\varphi}) + mgl \sin \varphi \\ &= m\ell^2 \ddot{\varphi}(t) + mgl \sin \varphi = 0 \end{aligned}$$

Physikalisch besagt diese Gleichung, dass eine „Rückstellkraft“  $f = -mgl \sin \varphi$  ein Drehmoment  $N = m\ell^2 \ddot{\varphi}(t)$  erzeugt. Nach Kürzen des Faktors  $m\ell^2$  ergibt sich die Bewegungsgleichung des mathematischen Pendels:

$$\ddot{\varphi}(t) + \frac{g}{\ell} \sin \varphi(t) = 0$$

Für kleine Auslenkungen aus der Ruhelage dürfen wir Linearisieren:  $\sin \varphi \approx \varphi$ . Es ergibt sich so die Bewegungsgleichung eines harmonischen Oszillators:

$$\ddot{\varphi}(t) + \omega^2 \varphi(t) = 0$$

mit der Frequenz  $f = \frac{1}{T}$ , wobei  $\frac{2\pi}{T} = \omega = \sqrt{\frac{g}{\ell}} = \frac{2\pi}{T}$  ist.

### Beispiel - Perle auf einem rotierenden geraden Draht

Eine kleine (durchbohrte) Perle gleitet ohne Reibung auf einem um die z-Achse rotierenden linearen Draht der senkrecht zur z-Achse montiert ist. Zur Beschreibung der Position der Perle auf dem in der Ebene  $z = 0$  rotierenden linearen Draht bieten sich ebene Polarkoordinaten an:

$$\begin{aligned} x(t) &= r(t) \cos \phi(t) \\ y(t) &= r(t) \sin \phi(t) \end{aligned}$$

Dabei ist  $\dot{\phi}(t) = \omega = \text{const.}$  die Rotationsgeschwindigkeit. Die kinetische Energie der Perle beträgt

$$K = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) = \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) = \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + \omega^2 r^2),$$

die potentielle Energie  $V$  ist in der gegebenen Geometrie eine Konstante. Damit folgt als Lagrange'sche Bewegungsgleichung:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} = m\ddot{r}(t) - m\omega^2 r(t) = 0$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung ist

$$r(t) = r_+ e^{\omega t} + r_- e^{-\omega t}$$

mit zwei Integrationskonstanten  $r_+$  und  $r_-$ . Im Allgemeinen wird die Perle sich von einer gegebenen Startposition  $r(t=0)$  mit exponentiell wachsender Geschwindigkeit ins Unendliche entfernen. Es gibt aber eine Ausnahme, bei der das Teilchen am Ort  $r(t=0) = r_-$  mit Anfangsgeschwindigkeit  $\dot{r}(t=0) = -\omega r_-$  startet. In dem Fall bewegt sich die Perle mit exponentiell abklingender Geschwindigkeit kriechend auf das Zentrum bei  $r = 0$  zu. Eine noch so kleine Störung dieser speziell gewählten Anfangswerte bewirkt allerdings, dass im Lauf der Zeit die exponentiell wachsende Lösung wieder dominiert und das Teilchen sich schließlich mit exponentiell wachsender Geschwindigkeit ins Unendliche entfernt. Nur die exponentiell wachsende Lösung ist stabil.

## 4.4 Invarianz der Lagrange-Bewegungsgleichungen unter Koordinatentransformationen

Die folgenden Betrachtungen beziehen sich auf allgemeine Koordinatentransformationen

$$q_k = q_k(t) = q_k[q'_1(t), q'_2(t), \dots, q'_M(t); t].$$

Unter Verwendung der Kettenregel ergibt sich für die verallgemeinerten Geschwindigkeiten

$$\begin{aligned} \dot{q}_k &= \frac{d}{dt} q_k(t) = \sum_{m=1}^M \frac{\partial q_k}{\partial q'_m} \cdot \frac{dq'_m}{dt} + \frac{\partial q_k}{\partial t} \\ &= \sum_{m=1}^M \frac{\partial q_k}{\partial q'_m} \cdot \dot{q}'_m + \frac{\partial q_k}{\partial t} \end{aligned}$$

Da die ursprünglichen Transformationsgleichungen nur von den neuen Koordinaten  $q'_m$  abhängen, aber nicht von den verallgemeinerten Geschwindigkeiten  $\dot{q}'_m$ , ist  $\dot{q}_k$  nur linear von den neuen verallgemeinerten Geschwindigkeiten  $\dot{q}'_m$  abhängig:

$$q_k = q_k[q'; t], \quad \dot{q}_k = q_k[q', \dot{q}', t],$$

wobei

$$\frac{\partial \dot{q}_k}{\partial \dot{q}'_n} = \frac{\partial q_k}{\partial q'_n}$$

Nach dem Gesagten ergibt sich eine Transformationsgleichung für die Lagrangefunktion:

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}, t) \mapsto \mathcal{L}'(q', \dot{q}', t) = \mathcal{L}[q(q', t), \dot{q}(q', \dot{q}', t), t]$$

Daher gilt wieder gemäß der Kettenregel

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial \dot{q}'_n} \right) = \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial q_k}{\partial q'_n} \right) = \sum_{m=1}^M \frac{\partial}{\partial q'_m} \left( \frac{\partial q_k}{\partial q'_n} \right) \dot{q}'_m + \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial q_k}{\partial q'_n}$$

Andererseits ist wegen der Vertauschbarkeit der partiellen Ableitung:

$$\frac{\partial \dot{q}_k}{\partial q'_n} = \frac{\partial}{\partial q'_n} \left( \frac{d}{dt} q_k \right) = \sum_{m=1}^M \frac{\partial}{\partial q'_n} \left( \frac{\partial q_k}{\partial q'_m} \right) \dot{q}'_m + \frac{\partial}{\partial q'_n} \frac{\partial q_k}{\partial t} = \sum_{m=1}^M \frac{\partial}{\partial q'_m} \left( \frac{\partial q_k}{\partial q'_n} \right) \dot{q}'_m + \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial q_k}{\partial q'_n}$$

Somit gilt die Identität

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial \dot{q}'_n} \right) = \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial q'_n}$$

Nun sei  $\mathcal{L}' = \mathcal{L}'(q', \dot{q}', t) = \mathcal{L}[q(q', t), \dot{q}(q', \dot{q}', t), t]$ , die durch die Koordinatentransformation  $q_k = q_k[q', t]$  aus der ursprünglichen Lagrangefunktion  $\mathcal{L}[q, \dot{q}, t]$  entstehende neue Lagrange-

funktion für die generalisierten Koordinaten  $q'_k, \dot{q}'_k, t$  mit  $(k = 1, 2, \dots, M)$ . Dann finden wir

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \left[ \frac{\partial \mathcal{L}'}{\partial \dot{q}'_k} \right] - \frac{\partial \mathcal{L}'}{\partial q'_k} &= \frac{d}{dt} \left[ \sum_{m=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_m} \cdot \frac{\partial \dot{q}_m}{\partial \dot{q}'_k} \right] - \sum_{m=1}^M \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_m} \cdot \frac{\partial q_m}{\partial q'_k} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_m} \cdot \frac{\partial \dot{q}_m}{\partial \dot{q}'_k} \right) \\
&= \sum_{m=1}^M \left( \frac{d}{dt} \left[ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_m} \right] \frac{\partial \dot{q}_m}{\partial \dot{q}'_k} + \underbrace{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_m} \frac{d}{dt} \left[ \frac{\partial \dot{q}_m}{\partial \dot{q}'_k} \right]}_{=\frac{\partial q_m}{\partial q'_k}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_m} \cdot \frac{\partial q_m}{\partial q'_k} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_m} \frac{\partial \dot{q}_m}{\partial \dot{q}'_k} \right) \\
&= \sum_{m=1}^M \underbrace{\left( \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_m} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_m} \right)}_{=0} \cdot \frac{\partial q_m}{\partial q'_k} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_m} \underbrace{\left( \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \dot{q}_m}{\partial \dot{q}'_k} \right) - \frac{\partial \dot{q}_m}{\partial \dot{q}'_k} \right)}_{=0} \\
&= 0
\end{aligned}$$

Die Lagrange-Bewegungsgleichungen bleiben also unter (lokal umkehrbaren) Koordinatentransformationen

$$q_k = q_k(q', t) \text{ bzw. } q'_n = q'_n(q, t)$$

*invariant!* Das heißt, ob die Koordinatentransformation vor oder nach der Bildung der Lagrangefunktion und dem Aufstellen der zugeordneten Bewegungsgleichungen erfolgt, stellt keinen Unterschied dar.

Die Invarianz der Lagrange-Bewegungsgleichungen unter solchen Punkttransformationen besitzt praktische Bedeutung! Denn es ist natürlich viel einfacher, den Skalar  $L(q, \dot{q}, t)$  zu transformieren als die zugeordneten Lagrange'schen Bewegungsgleichungen!

## 4.5 Nichteindeutigkeit der Lagrangefunktion

Die Lagrangefunktion  $\mathcal{L}(q, \dot{q}, t)$  ist *nicht* eindeutig! Wir bilden aus einer beliebig gegebenen Lagrangefunktion  $\mathcal{L}(q, \dot{q}, t)$  eine neue Lagrangefunktion  $\widetilde{\mathcal{L}}(q, \dot{q}, t)$  gemäß der Vorschrift

$$\widetilde{\mathcal{L}}(q, \dot{q}, t) = \mathcal{L}(q, \dot{q}, t) - \frac{d}{dt} \Lambda(q, t).$$

Dann gilt wegen 4.7:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \widetilde{\mathcal{L}}}{\partial \dot{q}_k} \right) - \frac{\partial \widetilde{\mathcal{L}}}{\partial q_k} &= \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \left[ \frac{\partial}{\partial \dot{q}_k} \left( \frac{d}{dt} \Lambda \right) \right] + \frac{\partial}{\partial q_k} \left[ \frac{d}{dt} \Lambda \right] \\
&= \underbrace{\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k}}_{=0} - \frac{d}{dt} \left[ \frac{\partial}{\partial \dot{q}_k} \left( \frac{d}{dt} \Lambda \right) \right] + \frac{\partial}{\partial q_k} \left[ \frac{d}{dt} \Lambda \right] \\
&= - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial}{\partial \dot{q}_k} \sum_{m=1}^M \left( \frac{\partial \Lambda}{\partial q_m} \cdot \dot{q}_m + \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial q_k} \left( \frac{d\Lambda}{dt} \right) - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \Lambda}{\partial q_k} \right) + \frac{\partial}{\partial q_k} \left( \frac{d\Lambda}{dt} \right) \\
&= 0
\end{aligned}$$

Lagrangefunktionen  $\mathcal{L}$  und  $\widetilde{\mathcal{L}}$ , die sich um eine totale zeitliche Ableitung

$$\frac{d}{dt} \Lambda(q, t) = \sum_{m=1}^M \frac{\partial \Lambda}{\partial q_m} \dot{q}_m + \frac{\partial \Lambda}{\partial t}$$

einer skalaren Funktion  $\Lambda = \Lambda(q, t)$  unterscheiden, besitzen identische Bewegungsgleichungen. Insbesondere ist die Definition des generalisierten Impulses gemäß

$$p_k = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k}$$

nicht eindeutig, und hängt von der Wahl der Lagrangefunktion ab! Die Lagrangefunktion  $\mathcal{L}$  und die Langragefunktion  $\tilde{\mathcal{L}}$  beschreiben manifest die gleiche Physik. Die erwähnte Nichteindeutigkeit des Impulses spielt eine über die Zielsetzung der klassischen Mechanik hinausgehende Rolle im Zusammenhang mit den sog. Eichtransformationen in der Quantenmechanik.

### Beispiel - Freies Teilchen

Die Lagrangefunktion eines freien Teilchens ist

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2} \dot{x}^2$$

Aus der Lagrange'schen Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} \\ &= \frac{d}{dt} (m\dot{x}) \end{aligned}$$

folgt sofort, dass der mechanische Impuls Erhaltungsgröße ist:

$$p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$$

und

$$\dot{p} = m\ddot{x} = 0.$$

Dies ist die Bewegungsgleichung des freien Teilchens.

Subtrahiert man die totale zeitliche Ableitung der Funktion  $\Lambda(x, t) = -F_0 \cdot x \cdot t$ , so entsteht die neue Lagrangefunktion

$$\tilde{\mathcal{L}} = \mathcal{L} - \frac{d}{dt} \Lambda = \frac{m}{2} \dot{x}^2 + F_0 x + F_0 \dot{x} t.$$

Die zugeordnete Lagrange'sche Bewegungsgleichung lautet

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}}{\partial x} = \frac{d}{dt} \tilde{p} - F_0$$

Mit

$$\tilde{p} = \frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} + F_0 t$$

folgt wieder

$$m\ddot{x} = 0.$$

Man vergleiche mit Abschnitt 1.2.1.



## 4.6 Geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld

Ein klassisches geladenes Teilchen ist ein Massenpunkt mit Masse  $m$ , Ladung  $e$  (positiv oder negativ geladen). Der Zusatz klassisch soll daran erinnern, daß es sich bei dem Teilchen nicht um ein Objekt der Quantentheorie handeln soll, insbesondere soll der Spin des Teilchens keine Rolle spielen! Ferner soll das Teilchen nicht mit dem von ihm selbst (z.B. bei Beschleunigungsvorgängen) erzeugten elektromagnetischen Strahlungsfeld wechselwirken!

Die im vorigen Abschnitt verwendete Argumentation zur Herleitung der Lagrange'schen Bewegungsgleichungen bezog sich auf konservative Kräfte:  $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = -\nabla V(\mathbf{r}, t)$ . Die Behandlung beliebiger geschwindigkeitsabhängiger Kräfte  $\mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  mit  $\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt}$  ist im Lagrangeformalismus im Allgemeinen nicht möglich. Aber es gibt eine Ausnahme, der in den Anwendungen große praktische Bedeutung zukommt. Diese Ausnahme betrifft spezielle geschwindigkeitsabhängige Kräfte der Gestalt:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = -\nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + \frac{d}{dt} [\nabla_{\mathbf{v}} V(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)]$$

Für eine derartige geschwindigkeitsabhängige Kraft zeigt man unschwer für die neue Lagrange-funktion

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \frac{m}{2} \langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle - V(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$$

dass die zugeordneten Lagrange'schen Bewegungsgleichungen mit den ursprünglichen Newton'schen Bewegungsgleichungen äquivalent sind:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}_j} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r_j} \\ &= \frac{d}{dt} [m\mathbf{v} - \nabla_{\mathbf{v}} V(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)]_j + [\nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)]_j \\ &= \left[ \frac{d}{dt} (m\mathbf{v}) - \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \right]_j \end{aligned}$$

Hervorzuheben ist, dass eine geschwindigkeitsabhängige Kraft nicht einfach als Gradient eines Potentials  $V$  darstellbar ist. Insofern ist es nicht richtig, den Term  $V(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  in der neuen Lagrange-funktion als potentielle Energie zu bezeichnen. Die konstruierte Lagrange-funktion für eine geschwindigkeitsabhängige Kraft ist manifest nicht die Differenz von kinetischer und potentieller Energie!

Wir betrachten jetzt elektromagnetische Felder  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  und  $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ , die in einem definierten Raumbereich des Laborsystems als Funktion der Zeit  $t$  von außen kontrolliert vorgegeben sind, etwa durch geeignete Anordnung von Kondensatorplatten und Spulen. Die Kinematik eines sich relativ zum Laborsystem mit Geschwindigkeit  $\dot{\mathbf{r}}(t)$  bewegenden klassischen geladenen Teilchens ist dann durch die sog. Lorentzkraft charakterisiert:

$$m\ddot{\mathbf{r}}(t) = e\mathbf{E}[\mathbf{r}(t), t] + e\dot{\mathbf{r}}(t) \wedge \mathbf{B}[\mathbf{r}(t), t]$$

Die angegebene Form der Bewegungsgleichung ist allerdings nur gültig, wenn man

- (i) die Einschränkung macht, dass die Rückkopplung der Eigenfelder des Teilchens auf die Laborfelder keine Rolle spielt, und
- (ii) dass die Geschwindigkeit des geladenen Teilchens relativ zum Laborsystem als klein gegenüber der Lichtgeschwindigkeit  $c$  angesehen werden darf:  $v = |\dot{\mathbf{r}}(t)| \ll c$ . Für große Geschwindigkeit des Teilchens müssen relativistische Effekte berücksichtigt werden.

Da die Lorentzkraft geschwindigkeitsabhängig ist, kann sie nicht einfach als Gradient einer skalaren Potentialfunktion dargestellt werden. Darin besteht eine gewisse Schwierigkeit, die es bei der Auffindung einer geeigneten Lagrangefunktion zu überwinden gilt.

Wir zeigen jetzt, dass

$$\mathcal{L}[\mathbf{r}(t), \dot{\mathbf{r}}(t), t] = \frac{m}{2} \langle \dot{\mathbf{r}}, \dot{\mathbf{r}} \rangle - eU(\mathbf{r}, t) + e \underbrace{\langle \dot{\mathbf{r}}(t), \mathbf{A}[\mathbf{r}(t), t] \rangle}_{\equiv \dot{r}_1 A_1 + \dot{r}_2 A_2 + \dot{r}_3 A_3} \quad (4.8)$$

eine geeignete Lagrangefunktion zur Beschreibung der Kinematik geladener Teilchen unter dem Einfluss der Lorentzkraft ist. Hier ist

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \wedge \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$$

der bekannte Zusammenhang zwischen der magnetischen Induktion  $\mathbf{B}$  und dem Vektorpotential  $\mathbf{A}$ . Wegen  $\nabla \mathbf{B} = 0$  ist das  $\mathbf{B}$ -Feld rein transversal. Das  $\mathbf{E}$ -Feld enthält sowohl longitudinale als auch transversale Freiheitsgrade:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla U(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$$

Die longitudinalen Freiheitsgrade des  $\mathbf{E}$ -Feldes werden durch den Gradienten des Skalarpotentials  $U(\mathbf{r}, t)$  dargestellt.

Der der Lagrangefunktion (4.8) zugeordnete kanonische Impuls ist

$$p_j = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}_j} = m\dot{r}_j + eA_j(\mathbf{r}, t)$$

Der kanonische Impuls  $\mathbf{p}(t)$  eines geladenen Teilchens unterscheidet sich in Gegenwart elektromagnetischer Felder vom rein mechanischen Impuls  $m\dot{\mathbf{r}}(t)$ !

Es folgt nun unter Verwendung der Kettenregel:

$$\frac{d}{dt} A_j[\mathbf{r}(t), t] = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial A_j}{\partial r_k} \dot{r}_k(t) + \frac{\partial}{\partial t} A_j[\mathbf{r}(t), t]$$

Somit erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}_j} \right) &= m\ddot{r}_j(t) + e \frac{d}{dt} A_j[\mathbf{r}(t), t] \\ &= m\ddot{r}_j(t) + e \sum_{k=1}^3 \frac{\partial A_j}{\partial r_k} \dot{r}_k(t) + e \frac{\partial}{\partial t} A_j[\mathbf{r}(t), t] \end{aligned}$$

$$-\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r_j} = e \frac{\partial U}{\partial r_j} - e \sum_k \frac{\partial A_k}{\partial r_j} \dot{r}_k(t)$$

Addition beider Ausdrücke liefert

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}_j} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r_j} \\ &= m\ddot{r}_j(t) + e \left( \frac{\partial U}{\partial r_j} + \frac{\partial}{\partial t} A_j[\mathbf{r}(t), t] \right) + e \sum_{k=1}^3 \left( \frac{\partial A_j}{\partial r_k} - \frac{\partial A_k}{\partial r_j} \right) \dot{r}_k(t) \end{aligned}$$

Der zweite und dritte Term ist identisch mit der (negativen) Lorentzkraft, wie die folgende Überlegung zeigt:

$$\begin{aligned} [\dot{\mathbf{r}} \wedge \mathbf{B}]_j &= [\dot{\mathbf{r}} \wedge (\nabla \wedge \mathbf{A})]_j \\ &= \sum_{m,l=1}^3 \varepsilon_{jml} \dot{r}_m [\nabla \wedge \mathbf{A}]_l \\ &= \sum_{a,b,m,l=1}^3 \varepsilon_{jml} \varepsilon_{lab} \dot{r}_m \frac{\partial}{\partial r_a} A_b \end{aligned}$$

Die „Zauberformel“, die man zur Vereinfachung des Ausdrucks braucht, ist die „Kontraktion zweier Levi-Civita-Symbole“<sup>2</sup>

$$\sum_{l=1}^3 \varepsilon_{jml} \varepsilon_{lab} = \delta_{ja} \delta_{mb} - \delta_{jb} \delta_{ma}$$

Es folgt somit:

$$\begin{aligned} [\dot{\mathbf{r}} \wedge (\nabla \wedge \mathbf{A})]_j &= \sum_{a,b,m=1}^3 (\delta_{ja} \delta_{mb} - \delta_{jb} \delta_{ma}) \dot{r}_m \frac{\partial}{\partial r_a} A_b \\ &= \sum_{m=1}^3 \left( \frac{\partial A_m}{\partial r_j} - \frac{\partial A_j}{\partial r_m} \right) \dot{r}_m \end{aligned}$$

Die Lagrange'sche Bewegungsgleichung ergibt jetzt:

$$\begin{aligned} m\ddot{r}_j &= -e \left( \frac{\partial A_j}{\partial t} + \frac{\partial U}{\partial r_j} \right) - e \sum_{m=1}^3 \left( \frac{\partial A_j}{\partial r_m} - \frac{\partial A_m}{\partial r_j} \right) \dot{r}_m \\ &= e [\mathbf{E} + \dot{\mathbf{r}} \wedge (\nabla \wedge \mathbf{A})]_j \\ &= e [\mathbf{E} + \dot{\mathbf{r}} \wedge \mathbf{B}]_j, \end{aligned}$$

was zu zeigen war.

Hervorzuheben ist, dass die elektromagnetischen Freiheitsgrade in der Lagrangefunktion durch den Term  $U - \langle \dot{\mathbf{r}}, \mathbf{A} \rangle$  gegeben sind, wobei  $U$  das elektrische Potential und  $\langle \dot{\mathbf{r}}, \mathbf{A} \rangle$  das Skalarprodukt von Teilchengeschwindigkeit  $\dot{\mathbf{r}}$  und Vektorpotential  $\mathbf{A}$  repräsentiert. Der tiefere Grund hierfür wird in der Relativitätstheorie gegeben:  $U - \langle \dot{\mathbf{r}}, \mathbf{A} \rangle$  ist ein Viererskalar.

Wir diskutieren nun, wie elektromagnetische und mechanische Einheiten über die Lorentzkraft voneinander abhängen. Sei  $\mathbf{E}'(\mathbf{r}', t)$  das wirkende elektrische Feld im (instantanen) Ruhesystem eines geladenen Teilchens. Dann erfährt das Teilchen im Ruhesystem eine Kraft  $\mathbf{F}'(\mathbf{r}', t) = e\mathbf{E}'(\mathbf{r}', t)$ . Bewegt sich das Teilchen relativ zum Laborsystem  $\mathbf{r} = \mathbf{v}t + \mathbf{r}'$  mit Geschwindigkeit  $|\mathbf{v}| \ll c$ , dann gilt unter Beachtung des für niedrige Relativgeschwindigkeit geltenden Zusammenhangs für die betreffenden elektromagnetischen Felder  $\mathbf{E}'(\mathbf{r}', t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ , weil die wirkende Kraft absolut und unabhängig vom gewählten Inertialsystem ist:  $\mathbf{F}'(\mathbf{r}', t) = \mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$ . Somit folgt der bekannte Ausdruck für die Lorentzkraft in einem Inertialsystem zu

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = e [\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)] \quad (4.9)$$

<sup>2</sup>Oft verwendet man die Einsteinsche Summenkonvention, d.h. über doppelt auftretende Indizes wird stillschweigend über den Wertevorrat der Indizes summiert! Dann kann man sich das Summenzeichen sparen.

### 4.6.1 Elektromagnetische Einheiten

Als Einheit der Ladung wählen wir  $[q]$ , als Einheit der Zeit  $[t]$ , als Einheit der Länge  $[l]$ . Die magnetische Induktion  $[B]$  messen wir als magnetischen Fluss  $[\Phi]$  pro Fläche  $[l^2]$ . Dann muss  $evB$  die physikalische Dimension einer Kraft haben:

$$\left[ \frac{l \Phi}{t l^2} \right] = [F],$$

also

$$[\Phi] = \left[ F \frac{1}{q} l \right].$$

Fixieren wir die Einheit  $[q]$  der elektrischen Ladung, so ist die Einheit  $[\Phi]$  für den magnetischen Fluss festgelegt. Die Einheit der elektrischen Spannung ergibt sich zu

$$[U] = \left[ \frac{\Phi}{t} \right].$$

Also ist die Einheit der elektrischen Feldstärke

$$[E] = \left[ \frac{\Phi}{t} \frac{1}{l} \right],$$

und diejenige der magnetischen Induktion

$$[B] = \left[ \frac{\Phi}{l^2} \right].$$

Aus den Maxwell'schen Gleichungen folgen sofort die Einheiten des elektrischen Verschiebungsfeldes,

$$[D] = [\varepsilon_0 E] = \left[ \frac{q}{l^2} \right],$$

und des Magnetfeldes,

$$[H] = \left[ \frac{1}{\mu_0} B \right] = \left[ \frac{q}{t} \frac{1}{l} \right].$$

Damit ist

$$[\varepsilon_0] = \left[ \frac{q}{\Phi} \frac{1}{l} \right]$$

und

$$[\mu_0] = \left[ \frac{\Phi}{q} \frac{1}{l} \right] = \left[ \frac{F}{\left(\frac{q}{t}\right)^2} \right].$$

Es folgt

$$\left[ \frac{1}{\varepsilon_0 \mu_0} \right] = \left[ \left( \frac{l}{t} \right)^2 \right].$$

Mit der Einheit

$$[I] = \left[ \frac{q}{t} \right]$$

für den elektrischen Strom folgt nun

$$[\mu_0] = \left[ \frac{F}{I^2} \right].$$

Ausgedrückt durch die Einheiten von Kraft  $[F]$  und Strom  $[I]$  ist  $\mu_0$  eine universelle Konstante, die durch das Experiment gegeben ist. Umgekehrt fixiert ein angenommener Wert von  $\mu_0$  die Einheit des elektrischen Stroms  $[I]$  ausgedrückt durch die mechanische Krafteinheit. Im System International d'Unités (SI-Einheiten) ist  $\mu_0 = 4\pi 10^{-7} \left[ \frac{F}{I^2} \right]$ .

Dann gilt mit  $[C]$  =Coulomb als Einheit der Ladung  $q$ ,  $[A]$  =Ampère als Einheit für den elektrischen Strom  $I$  und  $[V]$  =Volt als Einheit für die elektrische Spannung  $U$ , des Weiteren  $[T]$  =Tesla als Einheit für die magnetische Induktion  $B$  und schliesslich  $[W]$  =Weber als Einheit für den magnetischen Fluss  $\Phi$ , sowie  $[m]$  =Meter als Einheit für die Länge  $l$ ,  $[s]$  =Sekunde als Einheit für die Zeit  $t$ ,  $[kg]$  =Kilogramm als Einheit für die Masse  $M$  und schließlich  $[N]$  =Newton als Einheit der Kraft  $F$  insgesamt der Zusammenhang:

$$\begin{aligned} [N] &= \left[ kg \frac{m}{s^2} \right] \\ [C] &= [As] \\ [V] &= \left[ \frac{Nm}{C} \right] = \left[ \frac{W}{s} \right] = \left[ \frac{Tm^2}{s} \right] = \frac{N}{Am} \frac{m^2}{s} = \left[ \frac{Nm}{As} \right] \\ [T] &= \left[ \frac{N}{Am} \right] \\ [W] &= [Tm^2] \end{aligned}$$

## 4.7 Lagrange-Multiplikatoren und Zwangskräfte

In zahlreichen Problemen der angewandten Mechanik sind die wirkenden Kräfte zusammen mit zusätzlichen geometrischen Nebenbedingungen für die Bewegung gegeben. Mechanische Maschinen wie Zahnräder, Triebwerke, Turbinen usw. sind in ihrer Bewegungsfreiheit typischerweise durch solche Nebenbedingungen eingeschränkt.

Die Methode der Lagrange-Multiplikatoren ist ein sehr allgemeines Verfahren zur Berücksichtigung von Nebenbedingungen. Eine skleronome und holonome Nebenbedingung hat generisch die Form  $G(r_1, r_2, \dots, r_{3N}) = 0$  und stellt eine Forderung dar, die an die erlaubten Lagekoordinaten der Teilchen eines Systems gestellt wird. Dies bedeutet eine Reduktion der Anzahl der Freiheitsgrade des Systems, da die Bewegung der Teilchen im System effektiv auf die Hyperfläche  $G = 0$  eingeschränkt ist. Soll sich z.B. ein Teilchen auf einer Kugelschale mit Radius  $R$  bewegen, dann ist die Nebenbedingung

$$G(r_1, r_2, r_3) = r_1^2 + r_2^2 + r_3^2 - R^2 = 0$$

zu erfüllen.

Im Allgemeinen kann die Einschränkung der Bewegung auf einen Unterraum, z.B. gegeben als Definitionsgleichung einer Fläche in der Form  $G(\mathbf{r}) = 0$ , als Resultat des Wirkens einer Zwangskraft senkrecht zu dieser Fläche verstanden werden. Wird Reibung berücksichtigt, so existiert zusätzlich eine tangential zur Oberfläche orientierte Reibungskraft. Da eine Zwangskraft  $\mathbf{Z}$ , die dafür sorgt, dass das Teilchen bei seiner Bewegung die vorgegebene Fläche nicht verlässt, keine Arbeit leisten soll, ist sie in Richtung des Normalenvektors der Fläche orientiert. Um das zu verdeutlichen, betrachten wir einen fixen Punkt  $\mathbf{r}_0$  auf der Fläche  $G(\mathbf{r}) = 0$ . Sei  $\mathbf{r}_0 + d\mathbf{r}$  ein Nachbarpunkt, der ebenfalls auf der Fläche liegen soll. Dann gilt

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}_0) &= 0 \\ G(\mathbf{r}_0 + d\mathbf{r}) &= 0 \end{aligned}$$

Für die Differenz ergibt sich für infinitesimal kleinen Abstand  $d\mathbf{r}$  :

$$0 = G(\mathbf{r}_0 + d\mathbf{r}) - G(\mathbf{r}_0) = \langle \nabla G, d\mathbf{r} \rangle$$

Da  $d\mathbf{r}$  am Ort  $\mathbf{r}_0$  tangential zur Oberfläche orientiert ist, folgt sofort, daß  $\nabla G(\mathbf{r}_0)$  parallel zur Flächennormalen ist, d.h.  $d\mathbf{r} \perp \nabla g$ . Für die Zwangskraft  $\mathbf{Z}(\mathbf{r}_0)$  an einem vorgegebenen Ort  $\mathbf{r}_0$

der Oberfläche können wir nun folgenden Ansatz machen:

$$\mathbf{Z}(\mathbf{r}_0) = \lambda \nabla G(\mathbf{r}_0)$$

Hier ist  $\lambda$  eine Größe, die den Betrag der wirkenden Zwangskraft  $\mathbf{Z}$  am Ort  $\mathbf{r}_0$  der Oberfläche festlegt. Man nennt  $\lambda$  einen „Lagrange-Multiplikator“.

Was ist zu tun, wenn in einem allgemeinen Fall die Elimination einer Teilmenge der Variablen  $q_k$  aus einer Anzahl  $L$  von gestellten Nebenbedingungen  $G_l(\mathbf{q}) = 0$ , mit  $1 \leq l \leq L$ , durch Einführung neuer Lagekoordinaten in expliziter Form nicht gelingt? Die Antwort auf diese Frage verdanken wir einem Gedanken von Lagrange. Anstatt nach einem Weg zu suchen, die ursprünglichen Variablen  $q_k$  aus den vorgegebenen Nebenbedingungen durch geschickte Parametrisierungen der Gestalt  $q_k(\mathbf{q}')$  mittels neuer verallgemeinerter Koordinaten  $q'_i$  zu eliminieren, so dass die Bahnen der Teilchen des Systems ausgedrückt durch die neuen Variablen  $q'_i$  die Nebenbedingungen automatisch erfüllen, *erhöht* Lagrange noch die Anzahl der ursprünglichen Variablen  $q_1, \dots, q_M$  um weitere *Schlupfvariable*  $\lambda_l$ , die sog. Lagrange-Multiplikatoren. Dabei benötigt man für jede gestellte Nebenbedingung  $G_l(\mathbf{q}) = 0$  einen Lagrange Multiplikator  $\lambda_l$ . Gemäss Lagrange betrachtet man sog. erweiterte generalisierte Koordinaten  $Q_j$

$$\mathbf{Q} = (\mathbf{q}; \lambda) = (q_1, q_2, \dots, q_M; \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_L)$$

und deren zeitlichen Ableitungen  $\dot{Q}_j$

$$\dot{\mathbf{Q}} = (\dot{\mathbf{q}}; \dot{\lambda}) = (\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_M; \dot{\lambda}_1, \dot{\lambda}_2, \dots, \dot{\lambda}_L)$$

und definiert mit diesen erweiterten Variablen eine erweiterte Lagrange-Funktion:

$$\widetilde{\mathcal{L}}(\mathbf{Q}, \dot{\mathbf{Q}}, t) = \overbrace{K(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) - V(\mathbf{q}, t)}^{\mathcal{L}(q, \dot{q}, t)} + \sum_{l=1}^L \lambda_l G_l(\mathbf{q})$$

Die zugeordneten Lagrange'schen Bewegungsgleichungen lauten

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \widetilde{\mathcal{L}}}{\partial \dot{Q}_j} \right) - \frac{\partial \widetilde{\mathcal{L}}}{\partial Q_j} = 0, \quad (4.10)$$

wobei  $j = 1, 2, \dots, M, M+1, \dots, M+L$ . Also erhalten wir für  $j = 1, \dots, M$  :

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j} = \sum_{l=1}^L \lambda_l \frac{\partial G_l}{\partial q_j}, \quad (4.11)$$

während für  $j = M+1, M+2, \dots, M+L$  mit  $l = k - M = 1, \dots, L$  gerade die  $L$  Nebenbedingungen generiert werden. Die erweiterte Lagrangefunktion darf man sich als aus zwei Untersystemen bestehend vorstellen, wobei das erste System das ursprüngliche physikalische System und das zweite System aus „unendlich“ schweren Teilchen mit Koordinaten  $\lambda_l$  besteht, die linear über die Nebenbedingungen an die Freiheitsgrade des physikalischen System gekoppelt sind.

$$G_l(\mathbf{q}) = 0$$

Das heißt die Berücksichtigung von Nebenbedingungen mittels der Methode der Lagrange-Multiplikatoren ist äquivalent zur Einführung von Zwangskräften<sup>3</sup>

$$f_j = \sum_{l=1}^L \lambda_l \frac{\partial G_l}{\partial q_j}$$

in den ursprünglichen Newton'schen Bewegungsgleichungen.

Eine Strategie zur Lösung besteht darin, durch zweimaliges Differenzieren der Nebenbedingungen  $G_l(\mathbf{q}) = 0$  eine Anzahl  $L$  neuer Gleichungen aufzustellen, in denen die Beschleunigungsterme  $\ddot{q}_k$  nur linear vorkommen und somit durch die entsprechenden Lagrange'schen Bewegungsgleichungen, die ja die unbekanntenen Lagrange-Multiplikatoren ebenfalls linear enthalten, ausgedrückt werden können:

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\frac{d}{dt}\right)^2 G_l(q) \\ &= \frac{d}{dt} \sum_{k=1}^M \frac{\partial G_l(q)}{\partial q_k} \dot{q}_k \\ &= \sum_{k,k'=1}^M \frac{\partial^2 G_l(q)}{\partial q_{k'} \partial q_k} \dot{q}_{k'} \dot{q}_k + \sum_{k=1}^M \frac{\partial G_l(q)}{\partial q_k} \ddot{q}_k \end{aligned}$$

Dies ergibt insgesamt  $L$  (lineare) Bestimmungsgleichungen für die Lagrange-Multiplikatoren  $\lambda_l$ , die nunmehr als Funktionen von  $q_k$  und  $\dot{q}_k$  bestimmt sind. Die so erhaltenen Ausdrücke für  $\lambda_l = \lambda_l(q_k, \dot{q}_k, t)$  sind in die Lagrange'schen Bewegungsgleichungen einzusetzen, womit die Lagrange-Multiplikatoren eliminiert sind! Die resultierenden  $M$  Differentialgleichungen sind Bewegungsgleichungen im üblichen Sinn der Newton'schen Mechanik und dienen der Bestimmung der  $q_k(t)$ . Dabei darf nicht vergessen werden, dass die Anfangswerte  $q_k(t=0)$  und  $\dot{q}_k(t=0)$  für die Koordinaten und Geschwindigkeiten kompatibel mit den gestellten Nebenbedingungen sein müssen!

Schließlich kann man, sobald die Lösung bekannt ist, zu den ursprünglichen kartesischen Koordinaten zurück transformieren und die wirkenden Zwangskräfte ablesen.

### Beispiel - Seilzugsystem

Wir betrachten (siehe Abbildung 4.3) ein Seilzugsystem in einem Schacht. Eine an einer Rolle aufgehängte schwere Masse  $m_a$  zieht im Schwerfeld der Erde effektiv an einem Seil, das über zwei starr gelagerte Umlenkrollen eine auf einem höheren Niveau  $z = H$  befindliche Masse  $m_b$  zieht. Jemand misst die *Beschleunigung* der Masse  $m_b$  in  $x$ -Richtung zu  $a_{m_b}$ . Gegen die als konstant angenommene Tangentialkraft (Reibungskraft)  $F_R$  leistet die Masse  $m_b$ , während sie gezogen wird, eine Arbeit  $F_R \cdot x_{m_b}(t)$ . Wie groß ist Reibungskraft  $F_R$ , die auf die Masse  $m_b$  einwirkt?

Machen wir zuerst einige vereinfachte Annahmen:

- Alle 3 Rollen sind ohne Reibung gelagert.
- Die Rotationsenergie der Rollen darf vernachlässigt werden.
- Die Verbindungsseile sind masselos.

<sup>3</sup> $f_k$  bezeichnet hier eine verallgemeinerte Kraft.

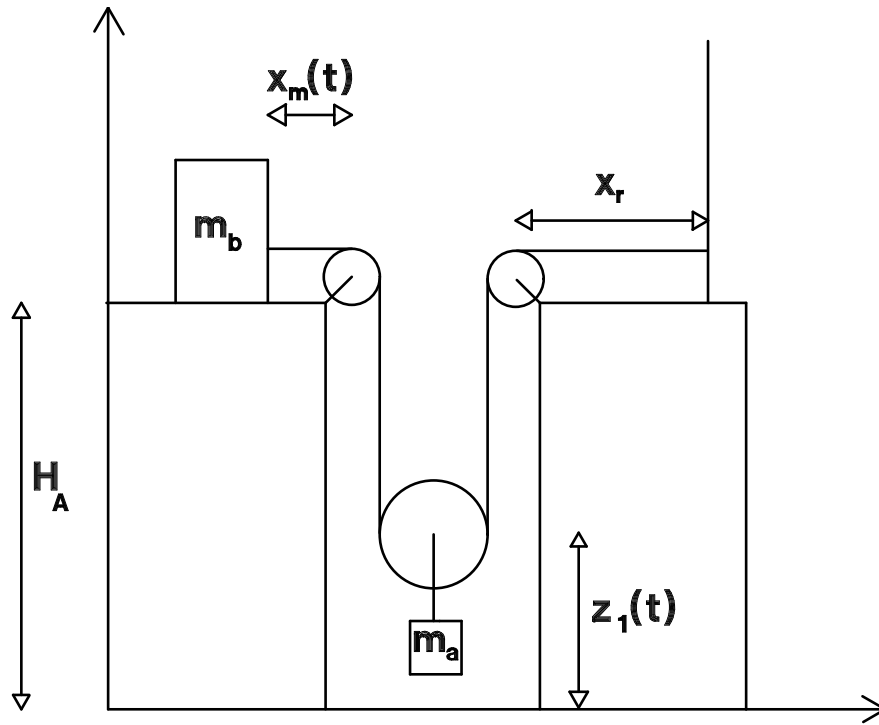


Abbildung 4.3: Skizze des Systems

Die Länge des Seils sei  $l = \text{const.}$  Aus der Skizze entnimmt man sofort die Nebenbedingung:

$$X_L - x_{m_b}(t) + 2[H - z_{m_a}(t)] + X_R = l$$

Die Lagrange-Funktion, aufgestellt mit den verallgemeinerten Koordinaten  $Q = (x_M, z_m, \lambda)$ , ergibt sich nach der angegebenen Vorschrift zu

$$\mathcal{L}(Q, \dot{Q}) = \begin{cases} \frac{m_b}{2} [\dot{x}_{m_b}(t)]^2 + \frac{m_a}{2} [\dot{z}_{m_a}(t)]^2 - m_a g z_{m_a}(t) - F_R \cdot x_{m_b}(t) \\ + \lambda \cdot [X_L - x_{m_b}(t) + 2H - 2z_{m_a}(t) + X_R - l] \end{cases}$$

Der Lagrangeparameter  $\lambda$  spielt hier die Rolle der verallgemeinerten dritten „Koordinate“. Aufstellen der entsprechenden Lagrange'schen Bewegungsgleichungen 4.11 ergibt:

$$\begin{aligned} m_b \ddot{x}_{m_b}(t) + F_R + \lambda &= 0 \\ m_a \ddot{z}_{m_a}(t) + m_a g + 2 \cdot \lambda &= 0 \end{aligned}$$

$$X_L - x_{m_b}(t) + 2H - 2z_{m_a}(t) + X_R - l = 0$$

Elimination des Parameters  $\lambda$  aus den beiden ersten Gleichungen ergibt:

$$2m_b \ddot{x}_{m_b}(t) - m_a \ddot{z}_{m_a}(t) + 2F_R - m_a g = 0$$

Die dritte Gleichung differenzieren wir zweimal nach  $t$ :

$$- \ddot{x}_{m_b}(t) - 2\ddot{z}_{m_a}(t) = 0 \quad (4.12)$$



Laut Voraussetzung ist  $\ddot{x}_{m_b}(t)$  durch Messung bekannt, also  $\ddot{x}_{m_b}(t) = a_{m_b}$ . Einsetzen liefert dann für die Beschleunigung in  $z$ -Richtung:

$$\ddot{z}_{m_a}(t) = -\frac{1}{2}a_{m_b}$$

Es folgt

$$(2m_b + \frac{m_a}{2})a_{m_b} + 2F_R - m_a g = 0$$

Das gesuchte Ergebnis für die Reibungskraft  $F_R$ , die auf die Masse  $m_b$  einwirkt, ist:

$$F_R = \frac{m_a}{2}g - (m_b + \frac{m_a}{4})a_{m_b}$$

Die Zugkraft am Seil auf die Masse  $m_a$  (in  $z$ -Richtung) ergibt sich nach dem Gesagten zu

$$F_z = \lambda \frac{\partial G}{\partial z} = -2\lambda = m_a \left( g - \frac{a_{m_b}}{2} \right)$$

### Beispiel - Atwood'sche Fallmaschine

Als weiteres Beispiel zum Formalismus der Lagrange-Parameter betrachten wir einen genial einfachen Apparat zur Erzeugung einer verkleinerten effektiven Fallbeschleunigung, die so genannte Atwood'sche Fallmaschine<sup>4</sup>. Wir wollen erreichen, dass die effektive Beschleunigung  $g'$  für eine am Seil hängende Masse kleiner ist als die Erdbeschleunigung:  $g' < g$ . In der 'Maschine' sind zwei Massen  $m_a$  und  $m_b$  mit einer (masselosen) Schnur der (effektiven) Länge  $l$  verbunden, welche (reibunglos) über eine Rolle (mit vernachlässigbar kleiner Rotationsenergie) rollt.

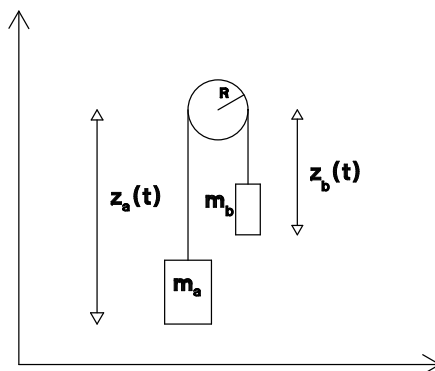


Abbildung 4.4: Atwood'sche Fallmaschine

Offensichtlich gilt (mit der Annahme  $R \ll l$ ) die Nebenbedingung:

$$G(z_a, z_b) = z_a(t) + z_b(t) - l = 0$$

Die Lagrange-Funktion, aufgestellt mit den verallgemeinerten Koordinaten  $\mathbf{Q} = (z_a, z_b, \lambda)$ , ergibt sich nach der angegebenen Vorschrift zu

$$\mathcal{L}(\mathbf{Q}, \dot{\mathbf{Q}}) = \left\{ \begin{array}{l} \frac{m_a}{2} [\dot{z}_a(t)]^2 + \frac{m_b}{2} [\dot{z}_b(t)]^2 - m_a g z_{m_a}(t) - m_b g z_{m_b}(t) \\ + \lambda \cdot [z_a(t) + z_b(t) - l] \end{array} \right.$$

<sup>4</sup>George Atwood

Wieder spielt der Lagrangeparameter  $\lambda$  die Rolle der verallgemeinerten dritten „Koordinate“. Aufstellen der entsprechenden Lagrange'schen Bewegungsgleichungen 4.11 ergibt:

$$\begin{aligned} m_a \ddot{z}_a(t) + m_a g - \lambda &= 0 \\ m_b \ddot{z}_b(t) + m_b g - \lambda &= 0 \\ z_a(t) + z_b(t) - l &= 0 \end{aligned}$$

Elimination von  $\lambda$  aus den beiden ersten Gleichungen liefert

$$m_a \ddot{z}_a(t) - m_b \ddot{z}_b(t) + (m_a - m_b)g = 0 \quad (4.13)$$

Zweimaliges Differenzieren der dritten Gleichung nach  $t$  liefert:

$$\ddot{z}_a(t) + \ddot{z}_b(t) = 0$$

Daraus erhält man direkt das Resultat:

$$\begin{aligned} \ddot{z}_a(t) &= \frac{m_b - m_a}{m_a + m_b} g = g' \\ \ddot{z}_b(t) &= -g' \end{aligned}$$

Während die größere Masse nach unten fährt, fährt die kleinere Masse nach oben. Dabei sind die Beschleunigungen der Massen entgegengesetzt gleich. Die Seilspannkraft, verursacht durch die beiden Massen  $m_a$  und  $m_a$ , ist unabhängig davon, ob die Massen sich bewegen, eine Konstante:

$$\begin{aligned} F_{z_a} &= \lambda \frac{\partial G}{\partial z_a} = \lambda \\ &= m_a(g' + g) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_{z_b} &= \lambda \frac{\partial G}{\partial z_b} = \lambda \\ &= m_b(-g' + g) \end{aligned}$$

Es gilt, wie man sofort nachrechnet:

$$m_a(g' + g) = \lambda = m_b(-g' + g)$$

## 4.8 Zusammenfassung

Der in diesem Kapitel behandelte Lagrange'sche Formalismus ist ein mächtiges Werkzeug der Theoretischen Mechanik, mit dem viele Probleme einfach und direkt zu lösen sind. So ist es z.B. sehr viel einfacher, den Skalar  $\mathcal{L} = K - V$  auf geeignete neue verallgemeinerte Koordinaten zu transformieren, und anschließend in den neuen Koordinaten die Lagrange'schen Bewegungsgleichungen aufzustellen, als direkt die gekoppelten vektoriiellen Newton'schen Bewegungsgleichungen von den alten Koordinaten auf die neuen verallgemeinerten Koordinaten zu transformieren! Bei Problemen mit eingeschränkten Freiheitsgraden ist die Methode der Lagrange-Multiplikatoren immer die Methode der Wahl, wenn es gilt, die auf ein bewegtes Teilchen wirkenden Zwangskräfte wirklich zu berechnen. Die Methode der Lagrange-Multiplikatoren ist im Vergleich zur direkten Behandlung konkreter Probleme mit Zwangskräften mittels Newton'scher Bewegungsgleichung wesentlich einfacher zu handhaben.

## Kapitel 5

# Hamilton-Formalismus und Kanonische Transformationen

### 5.1 Vorbemerkungen

Grundlegend für die Hamilton'sche Formulierung der klassischen Mechanik ist das Konzept des *Phasenraums*, das bereits im ersten Kapitel vorgestellt wurde. Physikalische Observablen wie Position, Impuls, Drehimpuls, Energie usw. eines Teilchens sind im Hamilton-Formalismus Funktionen auf dem Phasenraum. Im Hamilton-Formalismus kommt den kanonischen Impulsen  $p_k = \frac{\partial \mathcal{L}(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}_k}$  der Teilchen eines System dieselbe tragende Rolle zu, wie den Lagekoordinaten  $q_k$  der Teilchen.

Während im Lagrange-Formalismus einem System mit  $M$  Freiheitsgraden eine Anzahl  $M$  gewöhnlicher Differentialgleichungen *zweiter* Ordnung als Lagrange'sche Bewegungsgleichungen zugeordnet sind, handelt es sich im Hamilton-Formalismus um die doppelte Anzahl  $2M$  gewöhnlicher Differentialgleichungen *erster* Ordnung, die dem System als Hamilton'sche Bewegungsgleichungen zugeordnet sind.

Das System der Hamilton'schen Bewegungsgleichungen ist tatsächlich unter einer sehr großen Gruppe von Transformationen, den sog. Kanonischen Transformationen, forminvariant. Die sich hieraus ergebende mathematische Struktur darf große Allgemeinheit beanspruchen und geht weit über die ursprüngliche Zielsetzung der Klassischen Mechanik hinaus!

Ausgehend von einem Gebiet  $\Omega(t=0)$  von Anfangswerten für die Freiheitsgrade des Systems (z.B. Orte und Impulse der Teilchen des Systems) erzeugen die  $2M$  Hamilton'schen Bewegungsgleichungen einen 'Fluss' im Phasenraum. Der Fluss eines Hamilton'schen Systems im Phasenraum ist inkompressibel, wie bei einer idealen Flüssigkeit. Dies ist die Aussage des Satzes von Liouville.

Der Hamilton-Formalismus ist Ausgangspunkt für die Entwicklung mächtiger Rechenmethoden, die z.B. in der Astronomie, der Statistischen Mechanik, der Quantenmechanik und der Beschleunigerphysik zum Einsatz kommen.

Die Hamilton'sche Formulierung der Mechanik ist Basiswissen für jeden Physiker.

## 5.2 Hamiltonfunktion und Hamilton'sche Bewegungsgleichungen

Die fundamentalen Newton'schen Bewegungsgleichungen der Mechanik bilden den Ausgangspunkt für den Lagrange-Formalismus. Beide Methoden beschreiben die gleiche Physik und liefern identische Resultate. Das trifft natürlich auch auf den Hamilton-Formalismus zu.

Lagrange-Formalismus und Hamilton-Formalismus hängen über eine sog. Legendre-Transformation zusammen.

Um zu erklären, was man unter einer Legendre-Transformation versteht, betrachten wir eine Funktion  $F(x, y)$  zweier Variablen  $x$  und  $y$ . Dann bilden wir das (totale) Differential

$$\begin{aligned} dF &= \frac{\partial F}{\partial x} dx + \frac{\partial F}{\partial y} dy \\ &= u dx + v dy \end{aligned}$$

Die neue Funktion

$$G = yv - F$$

ist tatsächlich nicht mehr eine Funktion der Variablen  $x$  und  $y$ , sondern eine Funktion von  $x$  und  $v$ , denn

$$dG = d(yv) - dF = v dy + y dv - u dx - v dy = y dv - u dx.$$

Somit ist  $G = G(x, v)$  eine Funktion der Variablen  $x$  und  $v$  mit der Eigenschaft:  $\frac{\partial G}{\partial x} = -u$  und  $\frac{\partial G}{\partial v} = y$ . Eine Legendre-Transformation ist also der Übergang von einer Funktion  $F(x, y)$  zu einer neuen Funktion  $G(x, v)$ , wobei gilt  $v = \frac{\partial F}{\partial y}$ . Die Funktion  $G(x, v)$  enthält aber dieselbe Information wie die ursprüngliche Funktion  $F(x, y)$ , wie man sich leicht überlegt!

Zur Überführung der Lagrange'schen Formulierung in die Hamilton'sche Formulierung lösen wir für ein festgehaltenes  $p_k$  die Gleichungen für den generalisierten Impuls

$$p_k = \frac{\partial \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)}{\partial \dot{q}_k},$$

nach den generalisierten Geschwindigkeiten  $\dot{q}_k$  auf, so dass jeweils eine Funktion

$$\dot{q}_k = \dot{q}_k(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$$

auf dem Phasenraum entsteht<sup>1</sup>. Der Wechsel von der Lagrangefunktion  $\mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$  zur sog. *Hamiltonfunktion*  $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$  erfolgt mittels einer Legendre-Transformation:

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \sum_{m=1}^M p_m \dot{q}_m - \mathcal{L}[q, \dot{q}(q, p, t), t]$$

Die Hamiltonfunktion ist eine Funktion auf dem  $2M$ -dimensionalen Phasenraum. Der Hamiltonfunktion  $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$  sind die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen zugeordnet. Dazu be-

<sup>1</sup>Näheres dazu z.B. in [Goldstein u. a. \(2002\)](#)

trachten wir das totale Differential der Lagrangefunktion:

$$\begin{aligned}
 d\mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) &= \sum_{k=1}^M \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} dq_k + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} d\dot{q}_k \right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \\
 &= \sum_{k=1}^M \left( \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \right) dq_k + p_k d\dot{q}_k \right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \\
 &= \sum_{k=1}^M (\dot{p}_k dp_k + p_k d\dot{q}_k) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt,
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

und berechnen anschließend das totale Differential der Hamiltonfunktion:

$$\begin{aligned}
 d\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) &= \sum_{k=1}^M \left( \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_k} dq_k + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k} dp_k \right) + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} dt \\
 &= \sum_{k=1}^M d(p_k \dot{q}_k) - d\mathcal{L} \\
 &= \sum_{k=1}^M [\dot{q}_k dp_k + p_k d\dot{q}_k - (\dot{p}_k dq_k + p_k d\dot{q}_k)] - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \\
 &= \sum_{k=1}^M (-\dot{p}_k dq_k + \dot{q}_k dp_k) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt
 \end{aligned} \tag{5.2}$$

Durch Koeffizientenvergleich mit (5.2) erhält man die gesuchten **Hamilton'schen Bewegungsgleichungen**

$$\begin{aligned}
 \dot{q}_k &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k} \\
 \dot{p}_k &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_k} \\
 \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} &= -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

Spezialisiert man auf ein kartesisches Koordinatensystem, so sieht man unschwer, daß die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen zu den Newton'schen Bewegungsgleichungen äquivalent sind! Falls die Lagrangefunktion  $\mathcal{L} = \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$  nicht explizit von der Zeit  $t$  abhängig ist, gilt

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = 0$$

Dann ist die Hamiltonfunktion zeitlich erhalten und es gilt der Energieerhaltungssatz:

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = E = \text{const.}$$

Falls die Hamiltonfunktion  $\mathcal{H}$  nicht explizit von einer verallgemeinerten Koordinate  $q_j$  abhängt, dann ist der zu  $q_j$  konjugierte Impuls  $p_j$  eine Erhaltungsgröße, denn  $\dot{p}_j = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_j} = 0$ , also  $p_j = \text{const.}$  Solche Koordinaten heißen *zyklisch*.

Eine kluge Strategie zur Lösung mechanischer Probleme besteht darin, geeignete Transformationen der Koordinaten  $\mathbf{q}$  und  $\mathbf{p}$  auf neue Koordinaten  $\mathbf{q}'$  und  $\mathbf{p}'$  zu finden, so dass in der neuen Hamiltonfunktion  $\mathcal{H}'(\mathbf{q}', \mathbf{p}', t)$  möglichst viele Variable  $q'_j$  zyklisch sind. Leider ist das einfacher gesagt als getan!

### 5.3 Erweiterter Phasenraum

Ist die Hamiltonfunktion  $\mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$  explizit von der Zeit  $t$  abhängig, so kann man formal eine neue 'zeitunabhängige' Hamiltonfunktion  $\mathbb{H}(\mathbb{Q}, \mathbb{P})$  auf einem um zwei Freiheitsgrade erweiterten Phasenraum konstruieren, u.z. gemäß der Einbettung:

$$\begin{aligned}\mathbb{Q}_j &= \begin{cases} q_j & \text{für } 1 \leq j \leq M \\ t & \text{für } j = 0 \end{cases} \\ \mathbb{P}_j &= \begin{cases} p_j & \text{für } 1 \leq j \leq M \\ -E & \text{für } j = 0 \end{cases} \\ \mathbb{Q} &= (t, \mathbf{q}) \\ \mathbb{P} &= (-E, \mathbf{p})\end{aligned}$$

$$\mathbb{H}(\mathbb{Q}, \mathbb{P}) = \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) - E$$

Die zugeordneten Hamilton'schen Bewegungsgleichungen lauten für  $j = 0, 1, 2, \dots, M$

$$\begin{aligned}\dot{\mathbb{Q}}_j &= \frac{\partial \mathbb{H}(\mathbb{Q}, \mathbb{P})}{\partial \mathbb{P}_j} \\ \dot{\mathbb{P}}_j &= -\frac{\partial \mathbb{H}(\mathbb{Q}, \mathbb{P})}{\partial \mathbb{Q}_j}\end{aligned}$$

Für  $1 \leq j \leq M$  stimmen die neuen Bewegungsgleichungen mit den alten Hamilton'schen Gleichungen überein. Für die neuen konjugierten Variablen  $t = \mathbb{Q}_0$  und  $-E = \mathbb{P}_0$  folgt:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbb{Q}}_0 &= \frac{\partial \mathbb{H}(\mathbb{Q}, \mathbb{P})}{\partial \mathbb{P}_0} = 1 \\ \dot{\mathbb{P}}_0 &= -\frac{\partial \mathbb{H}(\mathbb{Q}, \mathbb{P})}{\partial \mathbb{Q}_0} = -\frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)}{\partial t}\end{aligned}$$

Die vorletzte Zeile ist gleichbedeutend mit  $\dot{t} = \frac{\partial [\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) - E]}{\partial (-E)} = 1$ , die letzte Zeile ist identisch mit  $\dot{E} = \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{L}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)}{\partial t}$ .

Falls die ursprüngliche Hamiltonfunktion  $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$  nicht explizit von  $t$  abhängt, so ist  $t$  eine zyklische Variable der Hamiltonfunktion  $\mathbb{H}(\mathbb{Q}, \mathbb{P})$  und es folgt der Energieerhaltungssatz:  $\dot{E} = 0$ , d.h.  $E = \text{const.}$ !

Aufgrund des beschriebenen Einbettungsverfahrens dürfen wir im Folgenden ohne Beschränkung der Allgemeinheit für die weitere Entwicklung der Theorie annehmen, dass die Hamiltonfunktion nicht explizit von der Zeit  $t$  abhängig ist.

## Teilchen im konservativen Kraftfeld, kartesische Koordinaten

Betrachten wir ein Teilchen der Masse  $m$  im Potential  $V(\mathbf{r})$  mit der kinetischen Energie  $K$ . Die Lagrangefunktion ist in diesem Fall

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = \frac{m}{2} \langle \dot{\mathbf{r}}, \dot{\mathbf{r}} \rangle - V(\mathbf{r})$$

woraus wir direkt die Bewegungsgleichung für die Bahn  $\mathbf{r}(t)$  erhalten:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}_k} \right) = \frac{d}{dt} (m \dot{r}_k) = - \frac{\partial V}{\partial r_k} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r_k}$$

Wir konstruieren nun nach dem angegebenen Verfahren die Hamilton-Funktion. Dafür wird als Erstes der konjugierte Impuls bzgl. der Koordinate  $r_k$  berechnet:

$$p_k = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}_k} = m \dot{r}_k \quad \Rightarrow \quad \dot{r}_k = \frac{1}{m} p_k$$

und damit die Hamiltonfunktion  $\mathcal{H}$  aufgestellt:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) &= \sum_{k=1}^3 p_k \dot{r}_k - \mathcal{L}[\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}(\mathbf{r}, p, t), t] = \sum_{k=1}^3 \left( p_k \dot{r}_k - \frac{m}{2} \dot{r}_k \dot{r}_k \right) + V(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{k=1}^3 \left( \frac{p_k p_k}{m} - \frac{m}{2} \frac{p_k p_k}{m^2} \right) + V(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle}{2m} + V(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

Damit lauten die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen zur Beschreibung der Kinematik eines Teilchens im konservativen Kraftfeld  $\mathbf{F} = -\nabla V(\mathbf{r})$ :

$$\begin{aligned} \dot{r}_k &= \frac{\partial H}{\partial p_k} = \frac{1}{m} p_k \\ \dot{p}_k &= - \frac{\partial H}{\partial r_k} = - \frac{\partial V}{\partial r_k} = F_k \end{aligned}$$

Der kanonische Impuls ist im betrachteten Fall gleich dem mechanischen Impuls  $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{r}}$  des Teilchens.

*Hier* ist also die Hamiltonfunktion gleich der Summe aus kinetischer und potentieller Energie

$$\mathcal{H} = K + V.$$

Eine additive Zusammensetzung der Hamiltonfunktion aus kinetischer Energie  $K$  und potentieller Energie  $V$  ist jedoch nicht immer gegeben!

## Hamiltonfunktion für geladene Teilchen

Ein geladenes klassisches Teilchen mit Ladung  $e$  und Masse  $m$  bewege sich im elektromagnetischen Feld:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \underbrace{-\vec{\nabla} U(\mathbf{r}, t)}_{\text{longitudinal}} - \partial_t \underbrace{\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}_{\text{transversal}} \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \underbrace{\nabla \wedge \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}_{\text{transversal}} \end{aligned}$$

Die zugeordnete Lagrangefunktion ist

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = \frac{m}{2} \langle \dot{\mathbf{r}}, \dot{\mathbf{r}} \rangle - \underbrace{eU(\mathbf{r}, t) + e \langle \dot{\mathbf{r}}, \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \rangle}_{V(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t)}$$

Der kanonische Impuls des Teilchens ist

$$p_j = \frac{\partial \mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{p}}, t)}{\partial \dot{r}_j} = m \dot{r}_j + e A_j(\mathbf{r}, t)$$

Um jetzt die Hamiltonfunktion nach der oben gegebenen Vorschrift zu konstruieren, müssen wir für einen fixen Wert von  $p_j$  die Geschwindigkeit  $\dot{r}_j$  des Teilchens durch den generalisierten Impuls  $p_j$  ausdrücken:

$$\dot{r}_j = \frac{1}{m} (p_j - e A_j(\mathbf{r}, t))$$

Die Hamiltonfunktion  $\mathcal{H} = \sum_i p_i \dot{q}_i - \mathcal{L}$  ist dann

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) &= \langle \mathbf{p}, \dot{\mathbf{r}} \rangle - \mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), t) \\ &= \frac{1}{m} \langle \mathbf{p}, \mathbf{p} - e \mathbf{A} \rangle - \frac{1}{2m} \langle \mathbf{p} - e \mathbf{A}, \mathbf{p} - e \mathbf{A} \rangle + eU(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{m} \langle \mathbf{p} - e \mathbf{A}, e \mathbf{A} \rangle \\ &= \frac{1}{2m} \langle \mathbf{p} - e \mathbf{A}, \mathbf{p} - e \mathbf{A} \rangle + eU(\mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

Die Umformungen, die zur letzten Zeile führen, sind elementar und beruhen auf der Bilinearität des Skalarprodukts.

Vergleicht man nun die Hamiltonfunktion für ein geladenes Teilchen mit derjenigen eines ungeladenen Teilchens im konservativen Kraftfeld, bemerkt man sofort, dass die Hamiltonfunktion für ein geladenes Teilchen immer noch gleich der Summe von kinetischer und potentieller Energie ist, denn die Geschwindigkeit des Teilchens ist  $\dot{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{p} - e \mathbf{A}}{m}$ . Also stellt  $\mathcal{H}$  auch in Gegenwart von (äußeren) Magnetfeldern die Gesamtenergie des Systems dar.

### 5.3.1 Beispiel - Bewegung im konstanten Magnetfeld

Wir betrachten ein geladenes Teilchen der Masse  $m$  und Ladung  $e$ , das sich in der  $x - y$  Ebene senkrecht zu einem konstanten Magnetfeld  $\mathbf{B} = B \mathbf{e}_3$  in  $z$ -Richtung bewegt. In dem Fall wird die Relation  $\mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A}(\mathbf{r})$  z.B. durch ein Vektorpotential der Form

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -By \mathbf{e}_1$$

erfüllt. Die Hamiltonfunktion des geladenen Teilchens im konstanten Magnetfeld ist dann gegeben zu

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} (p_x + eBy)^2 + \frac{1}{2m} p_y^2$$

Die zugeordneten Hamilton'schen Bewegungsgleichungen sind

$$\begin{aligned} \dot{p}_x &= 0 \\ \dot{x} &= \frac{1}{m} (p_x + eBy) \\ \dot{p}_y &= -\frac{eB}{m} (p_x + eBy) \\ \dot{y} &= \frac{p_y}{m} \end{aligned}$$



Hieraus folgt sofort

$$\begin{aligned} p_x &= \text{const.} = m\dot{x} - eBy = -eBy_0 \\ \dot{p}_y &= -eB\dot{x} \end{aligned}$$

Also insbesondere mit einer Integrationskonstanten  $x_0$  :

$$p_y = -eB(x - x_0)$$

Somit

$$m\ddot{x} = \dot{p}_x + eB\dot{y} = eB\dot{y} = eB\frac{p_y}{m} = -m\left(\frac{eB}{m}\right)^2(x - x_0)$$

Es folgt die bekannte DGL eines harmonischen Oszillators:

$$\frac{d^2}{dt^2}(x - x_0) + \left(\frac{eB}{m}\right)^2(x - x_0) = 0$$

Ganz entsprechend findet man die Differentialgleichung für  $y(t)$ . Die Lösungen für  $x(t)$  und  $y(t)$  beschreiben harmonische Schwingungen mit der charakteristischen Frequenz  $\omega_c = 2\pi f = \frac{eB}{m}$  :

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 + R \sin(\omega_c t) \\ y(t) &= y_0 + R \cos(\omega_c t) \end{aligned}$$

Die Bahnkurve  $\mathbf{r}(t) = (x(t), y(t))$  des geladenen Teilchens ist ein Kreis mit Mittelpunkt  $(x_0, y_0)$ , wobei der Radius  $R$  des Kreises durch die Energie  $E$  des Teilchens festgelegt ist:

$$\begin{aligned} E = \mathcal{H} &= \frac{1}{2m}(p_x + eBy)^2 + \frac{1}{2m}p_y^2 \\ &= \frac{1}{2m}(m\dot{x})^2 + \frac{1}{2m}[eB(x - x_0)]^2 \\ &= \frac{1}{2m}(eB)^2 R^2, \end{aligned}$$

also  $R = \frac{\sqrt{2mE}}{eB}$ .

## 5.4 Poissonklammern

Wir diskutieren in diesem Abschnitt eine Methode, die es erlaubt, Probleme der Hamilton'schen Mechanik auf *algebraische* Weise zu lösen<sup>2</sup>. Gegeben sei eine Hamiltonfunktion  $\mathcal{H}$  auf dem Phasenraum. Wir dürfen ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen, dass die Hamiltonfunktion autonom ist, d.h. nicht explizit von der Zeit  $t$  abhängt. Denn ist die Hamiltonfunktion  $\mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$  explizit von  $t$  abhängig, so kann man, wie bereits bemerkt, eine 'zeitunabhängige' Hamiltonfunktion  $\mathbb{H}(\mathbb{Q}, \mathbb{P}) = \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) - E$  auf einem um zwei Freiheitsgrade  $(t, -E)$  erweiterten Phasenraum definieren, so dass der alte Phasenraum  $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$  in den

<sup>2</sup>Die Beschreibung der Kinematik eines rotierenden starren Körpers mit Poissonklammern weist eine enge Analogie zur Algebra der Drehimpulsoperatoren in der Quantenmechanik auf!

erweiterten Phasenraum  $(\mathbb{Q}, \mathbb{P})$  eingebettet ist:

$$\mathbb{Q}_j = \begin{cases} q_j & \text{für } 1 \leq j \leq M \\ t & \text{für } j = 0 \end{cases}$$

$$\mathbb{P}_j = \begin{cases} p_j & \text{für } 1 \leq j \leq M \\ -E & \text{für } j = 0 \end{cases}$$

$$\mathbb{Q}_0 = t$$

$$\mathbb{P}_0 = -E$$

$$\mathbb{Q} = (t, \mathbf{q})$$

$$\mathbb{P} = (-E, \mathbf{p})$$

Der erweiterte Phasenraum hat somit zwei Freiheitsgrade mehr als der ursprüngliche Phasenraum!

Es gelten für  $j = 0, 1, \dots, M$  die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbb{Q}}_j &= \frac{\partial \mathbb{H}(\mathbb{Q}, \mathbb{P})}{\partial \mathbb{P}_j} \\ \dot{\mathbb{P}}_j &= -\frac{\partial \mathbb{H}(\mathbb{Q}, \mathbb{P})}{\partial \mathbb{Q}_j} \end{aligned}$$

Mit Hilfe der schiefsymmetrischen Blockmatrix

$$\begin{aligned} \varepsilon_{jk} &= \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{0} \end{bmatrix}_{jk} = -\varepsilon_{kj} \\ j, k &\in \{0, 1, \dots, M\} \end{aligned}$$

können wir die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen für die  $2 \times (M + 1)$  Variablen  $\mathbb{X}_c$

$$\begin{aligned} \mathbb{X}_c &= (\mathbb{Q}, \mathbb{P})_c = (\mathbb{Q}_0, \mathbb{Q}_1, \dots, \mathbb{Q}_M, \mathbb{P}_0, \mathbb{P}_1, \dots, \mathbb{P}_M)_c \\ c &\in \{1, 2, \dots, 2 \times (M + 1)\} \end{aligned}$$

kompakt darstellen:

$$\dot{\mathbb{X}}_b = \sum_c \varepsilon_{bc} \frac{\partial \mathbb{H}(\mathbb{X})}{\partial \mathbb{X}_c} \quad (5.4)$$

Wir betrachten einen generischen, festgehaltenen Punkt im (erweiterten) Phasenraum:  $\mathbb{X}^{(0)} = [\mathbb{Q}^{(0)}, \mathbb{P}^{(0)}]$ . Wird dieser Punkt als Anfangswert gewählt, so sind die (späteren) durch Lösen der Hamilton'schen Bewegungsgleichungen berechneten Zustände  $\mathbb{X}(t) = [\mathbb{Q}(t), \mathbb{P}(t)]$  des Systems funktional vom Anfangswert  $\mathbb{X}^{(0)}$  abhängig, wobei

$$\mathbb{X}(t=0) = \mathbb{X}^{(0)}$$

Dann kann eine generische Funktion  $A[\mathbb{X}(t)]$  entlang der Trajektorie  $\mathbb{X}(t)$  im Phasenraum ebenso als Funktion von  $t$  und dem (zeitunabhängigen!) Anfangswert  $\mathbb{X}^{(0)}$  angesehen werden:

$$A[\mathbb{X}(t)] = a(t; \mathbb{X}^{(0)})$$

Die Rate, mit der sich diese Funktion z.B. bei  $t = 0$  ändert, ist

$$\begin{aligned}
\left[ \frac{\partial}{\partial t} a(t; \mathbb{X}^{(0)}) \right]_{t=0} &= \left( \sum_b \frac{\partial A[\mathbb{X}(t)]}{\partial \mathbb{X}_b(t)} \dot{\mathbb{X}}_b \right)_{t=0} \\
&= \left( \sum_{b,c} \frac{\partial A[\mathbb{X}(t)]}{\partial \mathbb{X}_b(t)} \varepsilon_{bc} \frac{\partial \mathbb{H}(\mathbb{X})}{\partial \mathbb{X}_c} \right)_{t=0} \\
&= \left( \sum_{b,c} \frac{\partial}{\partial \mathbb{X}_b(t)} \varepsilon_{bc} \frac{\partial \mathbb{H}(\mathbb{X})}{\partial \mathbb{X}_c} \right)_{t=0} A[\mathbb{X}(t=0)] \\
&= \left( \sum_{b,c} \frac{\partial \mathbb{H}(\mathbb{X})}{\partial \mathbb{X}_c} \varepsilon_{bc} \frac{\partial}{\partial \mathbb{X}_b(t)} \right)_{t=0} a(t=0; \mathbb{X}^{(0)}) \\
&= \mathcal{L} a(t=0; \mathbb{X}^{(0)})
\end{aligned}$$

Entsprechend folgt für die zweite, dritte, usw. Ableitung nach der Zeit  $t$ :

$$\begin{aligned}
\left[ \frac{\partial^n}{\partial t^n} a(t; \mathbb{X}^{(0)}) \right]_{t=0} &= [\mathcal{L}]^n a(t=0; \mathbb{X}^{(0)}) \\
&= \underbrace{[\mathcal{L} \circ \mathcal{L} \circ \dots \circ \mathcal{L}]}_{\text{Operator } n\text{-mal anwenden}} a(t=0; \mathbb{X}^{(0)}) \\
&= \mathcal{L} \left( [\mathcal{L}]^{n-1} a(t=0; \mathbb{X}^{(0)}) \right)
\end{aligned}$$

Der Differentialoperator

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} &= \sum_{b,c} \frac{\partial \mathbb{H}(\mathbb{X})}{\partial \mathbb{X}_c} \varepsilon_{bc} \frac{\partial}{\partial \mathbb{X}_b} \\
&= \sum_{j=0}^M \left( \frac{\partial \mathbb{H}(\mathbb{Q}, \mathbb{P})}{\partial \mathbb{P}_j} \frac{\partial}{\partial \mathbb{Q}_j} - \frac{\partial \mathbb{H}(\mathbb{Q}, \mathbb{P})}{\partial \mathbb{Q}_j} \frac{\partial}{\partial \mathbb{P}_j} \right) \\
&= \sum_{j=1}^M \left( \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)}{\partial p_j} \frac{\partial}{\partial q_j} - \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)}{\partial q_j} \frac{\partial}{\partial p_j} \right) + \left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)}{\partial t} \frac{\partial}{\partial E} \right)
\end{aligned}$$

wirkt auf Funktionen im (erweiterten) Phasenraum und heißt *Liouville Operator*.

Für unendlich oft differenzierbare Phasenraumfunktionen ergibt die Taylorreihe um  $t = 0$ :

$$\begin{aligned}
a(t; \mathbb{X}) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \left[ \frac{\partial^n}{\partial t^n} a(t; \mathbb{X}) \right]_{t=0} \\
&= \left( \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} [\mathcal{L}]^n \right) a(t=0; \mathbb{X}) \\
&= \exp[t\mathcal{L}] a(t=0; \mathbb{X})
\end{aligned}$$

Das heißt, es gilt für jede (unendlich oft differenzierbare) Funktion  $a(t; \mathbb{X}) \equiv A[\mathbb{X}(t)]$  mit  $\mathbb{X} = \mathbb{X}(t=0)$  auf dem Phasenraum:

$$A[\mathbb{X}(t)] = \exp[t\mathcal{L}] A(\mathbb{X})$$

Der Operator  $\exp[(t_b - t_a)\mathcal{L}]$  propagiert jeden Funktionswert  $A[\mathbb{X}(t = t_a)]$  entlang der Trajektorie  $\mathbb{X}(t)$  zum Funktionswert  $A[\mathbb{X}(t = t_b)]$ . Es gilt insbesondere:

$$\mathbb{X}(t) = \exp(t\mathcal{L})\mathbb{X}$$

und

$$\exp(t\mathcal{L})A(\mathbb{X}) = A[\mathbb{X}(t)] = A[\exp(t\mathcal{L})\mathbb{X}]$$

Entsprechend ergibt sich für ein Produkt von zwei Funktionen auf dem Phasenraum

$$\begin{aligned} & \exp(t\mathcal{L})[A(\mathbb{X})B(\mathbb{X})] \\ &= [\exp(t\mathcal{L})A(\mathbb{X})][\exp(t\mathcal{L})B(\mathbb{X})] \\ &= A[\mathbb{X}(t)]B[\mathbb{X}(t)] \end{aligned}$$

Diese Identitäten beruhen auf der Eigenschaft, dass die durch einen fest gegebenen Punkt  $\mathbb{X}$  im Phasenraum laufende Trajektorie  $\mathbb{X}(t)$  mit dem Startwert  $\mathbb{X}(t = 0) = \mathbb{X}$  eindeutig ist!

Eine wichtige Eigenschaft des Liouville-Operators betrifft Integrale über ein Volumen  $\Omega = V_{\mathbb{Q}} \times V_{\mathbb{P}}$  des Phasenraums, wobei wir voraussetzen, dass die Funktionen  $A(\mathbb{X})$  und  $B(\mathbb{X})$  außerhalb des Gebietes  $\Omega$  verschwinden:

$$\int_{\Omega} d\Omega A(\mathbb{X})[\mathcal{L}B(\mathbb{X})] = - \int_{\Omega} d\Omega [\mathcal{L}B(\mathbb{X})]A(\mathbb{X})$$

Die Formel besagt, dass der Liouville Operator antihermitesch ist. Der Beweis beruht auf partieller Integration. Die bei der partiellen Integration erzeugten Randterme verschwinden aufgrund der Voraussetzungen für  $A(\mathbb{X})$  und  $B(\mathbb{X})$ . Diese Voraussetzungen sind nicht wirklich einschränkend: oft ist die Energie eines Systems eine endliche Konstante, die Teilchen sind in einen Kasten mit Volumen  $|V_{\mathbb{Q}}|$  eingesperrt. Sind  $A(\mathbb{X})$  und  $B(\mathbb{X})$  Verteilungsfunktionen im Phasenraum, so sind  $A(\mathbb{X})$  und  $B(\mathbb{X})$  für Lagekoordinaten  $\mathbb{Q}$  außerhalb des Kastens gleich Null. Damit liefert partielle Integration bzgl. der Ortsvariablen keine Randterme. Die Anzahl von Teilchen, die einen großen Impuls besitzen, strebt für sehr große Impulse  $\mathbb{P}$  gegen Null, d.h. wenn auch  $|V_{\mathbb{P}}|$  hinreichend groß gewählt ist, liefert partielle Integration bzgl. der Impulsvariablen ebenfalls keine Randterme.

Wir definieren jetzt die nach Poisson<sup>3</sup> benannte bilineare Relation zwischen zwei Funktionen  $A(\mathbb{X})$  und  $B(\mathbb{X})$  auf dem Phasenraum, die sog. *Poissonklammer*:

$$\{A, B\} = \sum_{j=0}^M \left( \frac{\partial A}{\partial Q_j} \frac{\partial B}{\partial P_j} - \frac{\partial A}{\partial P_j} \frac{\partial B}{\partial Q_j} \right)$$

Damit ergibt sich für eine Funktion  $a(t; \mathbb{X})$  auf dem Phasenraum die Darstellung ihrer zeitlichen Ableitung als Poissonklammer mit der Hamiltonfunktion:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}a(t; \mathbb{X}) &= \{a, \mathbb{H}\} \\ &= \mathcal{L}a(t; \mathbb{X}) \end{aligned}$$

Wählt man anstelle der allgemeinen Funktion  $a(t; \mathbb{X})$  auf dem Phasenraum insbesondere die Koordinatenfunktionen  $a = Q_k$  bzw.  $a = P_k$ , so erhält man hieraus sofort für  $k = 0, 1, 2, \dots, M$  die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen als Poissonklammer:

<sup>3</sup>Nach [Simon Denis Poisson](#), französischer Physiker und Mathematiker.

$$\dot{Q}_k = \frac{d}{dt}Q_k = \{Q_k, \mathbb{H}(\mathbb{Q}, \mathbb{P})\} \quad (5.5)$$

$$\dot{P}_k = \frac{d}{dt}P_k = \{P_k, \mathbb{H}(\mathbb{Q}, \mathbb{P})\} \quad (5.6)$$

Für die Wahl  $a(t; \mathbb{X}) = \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$  folgt sofort

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) &= \{\mathcal{H}, \mathbb{H}(\mathbb{Q}, \mathbb{P})\} \\ &= \{\mathcal{H}, H - E\} \\ &= \{\mathcal{H}, -E\} \\ &= \frac{\partial}{\partial t}\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \end{aligned}$$

Hängt die Hamiltonfunktion  $\mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$  nicht explizit von der Zeit  $t$  ab, gilt der Erhaltungssatz:

$$\frac{d}{dt}\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = 0$$

Für die kanonischen Variablen  $q_k$  und  $p_k$ , erhält man unmittelbar aus der definierenden Gleichung der Poissonklammer die Werte

$$\begin{aligned} \{q_k, q_j\} &= 0 \\ \{p_k, p_j\} &= 0 \\ \{q_k, p_j\} &= \delta_{k,j} \end{aligned}$$

Man nennt diese Poissonklammern fundamental, weil sich mit ihrer Hilfe (im Prinzip!) alle Probleme der Hamilton'schen Mechanik auf algebraische Operationen mit Poissonklammern zurückführen lassen.

Sei  $\mathbf{x}(t) = [\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)]$ . Dann gilt mit  $\mathbf{x} = \mathbf{x}(t=0) = [\mathbf{q}(t=0), \mathbf{p}(t=0)] = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$ :

$$\begin{aligned} \{x_b(t), x_c(t)\} &= \{\exp[t\mathcal{L}]x_b(t=0), \exp[t\mathcal{L}]x_c(t=0)\} \\ &= \exp[t\mathcal{L}][\{x_b(t=0), x_c(t=0)\}] \\ &= \exp[t\mathcal{L}][\{x_b, x_c\}] \\ &= \{x_b, x_c\}, \end{aligned}$$

denn wegen  $\{x_k, x_j\} = \varepsilon_{bc} = \text{const.}$  verschwinden alle höheren Ableitungen:  $\mathcal{L}(\{x_k, x_j\}) = 0$ . Also folgt nach dem Gesagten die Invarianz der fundamentalen Poissonklammern des Systems im Lauf der zeitlichen Evolution :

$$\begin{aligned} \{q_k(t), q_j(t)\} &= 0 \\ \{p_k(t), p_j(t)\} &= 0 \\ \{q_k(t), p_j(t)\} &= \delta_{k,j} \end{aligned}$$

#### 5.4.1 Beispiel - Freier Fall

Die Hamiltonfunktion beim freien Fall eines Teilchens im homogenen Schwerfeld der Erde ist:

$$\mathcal{H}(z, p) = \frac{p^2}{2m} + mgz$$

Anfangsbedingungen zur Zeit  $t = 0$ :

$$\begin{aligned} z(t=0) &= z_0 \\ p(t=0) &= p_0 = mv_0 \end{aligned}$$

Der zugeordnete Liouville-Operator lautet

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial z} \frac{\partial}{\partial p} \\ &= \frac{p}{m} \partial_z - mg \partial_p \end{aligned}$$

Mit

$$\begin{aligned} \mathcal{L}z &= \frac{p}{m} \\ \mathcal{L}^2 z &= \mathcal{L}[\mathcal{L}z] = \mathcal{L}\left(\frac{p}{m}\right) = -g \\ \mathcal{L}^3 z &= \mathcal{L}[\mathcal{L}^2 z] \equiv 0 \end{aligned}$$

folgt sofort die Lösung:

$$\begin{aligned} z(t) &= [\exp[\mathcal{L}(z, p)]z]_{z=z_0, p=p_0} \\ &= \left[ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} [\mathcal{L}(z, p)]^n z \right]_{z=z_0, p=p_0} \\ &= \left[ \left( 1 + \frac{p}{m}t - g\frac{t^2}{2} \right) z \right]_{z=z_0, p=p_0} \\ &= z_0 + v_0 t - \frac{g}{2} t^2 \end{aligned}$$

### 5.4.2 Algebraische Rechenregeln für Poissonklammern

Für drei Funktionen auf dem Phasenraum,  $A(\mathbb{Q}, \mathbb{P})$ ,  $B(\mathbb{Q}, \mathbb{P})$  und  $C(\mathbb{Q}, \mathbb{P})$ , gelten die Rechenregeln:

1. Vertauschen der Argumente der Poissonklammer liefert

$$\{A, B\} = -\{B, A\}.$$

Diese Eigenschaft folgt direkt aus der Definition der Poissonklammer

$$\{A, B\} = \sum_{j=0}^M \left( \frac{\partial A}{\partial \mathbb{Q}_j} \frac{\partial B}{\partial \mathbb{P}_j} - \frac{\partial A}{\partial \mathbb{P}_j} \frac{\partial B}{\partial \mathbb{Q}_j} \right)$$

2. Für eine Konstante  $c$  gilt:

$$\{A, c\} = 0.$$

Auch diese Eigenschaft ist eine direkte Folge der Definition, denn die Ableitung einer Konstanten ist identisch Null.

3. Falls ein Argument die Summe zweier Funktionen enthält, gilt

$$\{A, B + C\} = \{A, B\} + \{A, C\}.$$

Ebenfalls eine Eigenschaft der Ableitung.

4. Sind  $A(\mathbb{Q}, \mathbb{P}; \lambda)$  und  $B(\mathbb{Q}, \mathbb{P}; \lambda)$  von einem Parameter  $\lambda$  abhängige Phasenraumfunktionen, so gilt für die Ableitung nach dem Parameter

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \{A, B\} = \left\{ \frac{\partial A}{\partial \lambda}, B \right\} + \left\{ A, \frac{\partial B}{\partial \lambda} \right\}$$

5. Wegen der Produktregel folgt für das Produkt zweier Funktionen im ersten (oder zweiten) Argument

$$\{A, BC\} = \{A, B\}C + B\{A, C\}$$

6. Es gilt die *Jacobi-Identität*

$$\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0$$

Um die Identität zu beweisen, benötigen wir (etwas) Geduld. Wir betrachten drei skalare Funktionen auf dem Phasenraum und fassen (zur Abkürzung der Schreibweise) die Variablen  $q_j$  und die Variablen  $p_j$  zu einem  $2\widetilde{M}$ -dimensionalen Vektor  $\mathbf{x}$  mit Komponenten  $x_j$  zusammen:

$$\begin{aligned} A &= A(\mathbb{Q}, \mathbb{P}) = A(\mathbb{X}) \\ B &= B(\mathbb{Q}, \mathbb{P}) = B(\mathbb{X}) \\ C &= C(\mathbb{Q}, \mathbb{P}) = C(\mathbb{X}). \end{aligned}$$

Die Poissonklammer kann dann mit Hilfe der schiefsymmetrischen  $2\widetilde{M} \times 2\widetilde{M}$ -Blockmatrix mit  $\widetilde{M} = 1 + M$ ,

$$\varepsilon_{jk} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{0} \end{bmatrix}_{jk} = -\varepsilon_{kj}$$

, in kompakter Notation dargestellt werden:

$$\{A, B\} = \sum_{j,k} \varepsilon_{jk} \frac{\partial A}{\partial x_j} \frac{\partial B}{\partial x_k}$$

Damit erhalten wir für den ersten Term in der Jacobi-Identität die Darstellung:

$$\begin{aligned} \{A, \{B, C\}\} &= \sum_{j,k,l,m} \varepsilon_{jk} \varepsilon_{lm} \frac{\partial A}{\partial x_l} \cdot \frac{\partial}{\partial x_m} \left[ \frac{\partial B}{\partial x_j} \frac{\partial C}{\partial x_k} \right] \\ &= \sum_{j,k,l,m} \varepsilon_{jk} \varepsilon_{lm} \frac{\partial A}{\partial x_l} \left[ \left( \frac{\partial}{\partial x_m} \frac{\partial B}{\partial x_j} \right) \cdot \frac{\partial C}{\partial x_k} + \frac{\partial B}{\partial x_j} \cdot \left( \frac{\partial}{\partial x_m} \frac{\partial C}{\partial x_k} \right) \right] \end{aligned}$$

Im zweiten Term der Summe erfolgt eine Indextransformation:

$$\left. \begin{array}{l} j \mapsto l' \\ l \mapsto k' \\ k \mapsto m' \\ m \mapsto j' \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{array}{l} \varepsilon_{lm} \rightarrow \varepsilon_{k'j'} = -\varepsilon_{j'k'} \\ \varepsilon_{jk} \rightarrow \varepsilon_{l'm'} \end{array} .$$

$$\{A, \{B, C\}\} = \sum_{j,k,l,m} \varepsilon_{jk} \varepsilon_{lm} \left[ \frac{\partial A}{\partial \mathbb{X}_l} \left( \frac{\partial}{\partial \mathbb{X}_m} \frac{\partial B}{\partial \mathbb{X}_j} \right) \frac{\partial C}{\partial \mathbb{X}_k} - \frac{\partial B}{\partial \mathbb{X}_l} \left( \frac{\partial}{\partial \mathbb{X}_j} \frac{\partial C}{\partial \mathbb{X}_m} \right) \frac{\partial A}{\partial \mathbb{X}_k} \right].$$

Addiert man die beiden anderen Beiträge, die durch zyklisches Vertauschen von  $A, B$  und  $C$  entstehen, so heben sich alle Beiträge gegenseitig auf, was zu zeigen war.

7. Betrachten wir Funktionen  $A(\mathbb{Q}, \mathbb{P})$  auf dem Phasenraum, die bzgl. der Argumente  $\mathbb{Q}_j$  und  $\mathbb{P}_j$  formale Potenzreihen (oder Polynome) sind, so gilt

$$\begin{aligned} \{\mathbb{P}_m, A\} &= -\frac{\partial A}{\partial \mathbb{Q}_m} \\ \{\mathbb{Q}_m, A\} &= \frac{\partial A}{\partial \mathbb{P}_m} \end{aligned}$$

Diese nützlichen Regeln folgen direkt aus der Definition der Poissonklammer.

### Bemerkung

In der Heisenberg'schen Formulierung der Quantenmechanik werden gemäß dem „Korrespondenzprinzip“ den Poissonklammern der Observablen  $A(\mathbb{Q}, \mathbb{P})$  bzw.  $B(\mathbb{Q}, \mathbb{P})$  sog. *Kommutatoren*

$$\{A, B\} \mapsto \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}]$$

zugeordnet. Diese sind definiert als

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A} \cdot \hat{B} - \hat{B} \cdot \hat{A}$$

$\hat{A}$  und  $\hat{B}$  sind dabei die quantenmechanischen hermiteschen *Operatoren*, die den (klassischen) Observablen  $A$  und  $B$  auf dem Phasenraum entsprechen.

### Erhaltungsgrößen

Wir verzichten jetzt bei der Betrachtung eines Systems mit explizit zeitabhängiger Hamiltonfunktion  $\mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$  auf das beschriebene Einbettungsverfahren. Eine Funktion  $a(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$  auf dem Phasenraum bezeichnet man als Erhaltungsgröße, wenn gilt:

$$\frac{da(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)}{dt} = 0 = \{a, \mathcal{H}\} + \frac{\partial a}{\partial t}.$$

Hieraus folgt sofort die Bewegungsgleichung einer Erhaltungsgröße  $a$  zu

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \{\mathcal{H}, a\}.$$

Wenn insbesondere  $a = a(\mathbf{q}, \mathbf{p})$  nicht explizit von  $t$  abhängt, lautet die Bedingung dafür, dass  $a$  Erhaltungsgröße ist, einfach  $\{\mathcal{H}, a\} = 0$ .

**Satz von Poisson.** Sind  $a(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$  und  $b(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$  zwei Erhaltungsgrößen, so ist die Poissonklammer  $\{a(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t), b(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)\}$  beider Funktionen ebenfalls eine Erhaltungsgröße. Zugleich ist auch die Linearkombination  $\lambda a(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) + \mu b(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$  mit zwei Konstanten  $\lambda$  und  $\mu$ , Erhaltungsgröße.



Der Beweis des zweiten Teils der Behauptung ist trivial. Der Beweis des ersten Teils ist mit Hilfe der Jacobi-Identität leicht zu führen.

Zunächst ist  $c(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \{a(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t), b(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)\}$  eine Funktion auf dem Phasenraum und besitzt als solche die Bewegungsgleichung:

$$\frac{d}{dt}c = \{c, \mathcal{H}\} + \frac{\partial c}{\partial t}$$

Die partielle Ableitung von  $c$  nach dem 'Parameter'  $t$  auf der rechten Seite der Gleichung berechnen wir mit der Regel 4. Dann ergibt sich für die totale Ableitung von  $c$  nach der Zeit  $t$ :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}c &= \{\{a, b\}, \mathcal{H}\} + \frac{\partial}{\partial t}\{a, b\} \\ &= \{\{a, b\}, \mathcal{H}\} + \left\{ \frac{\partial}{\partial t}a, b \right\} + \left\{ a, \frac{\partial}{\partial t}b \right\} \\ &= \{\{a, b\}, \mathcal{H}\} + \{\{\mathcal{H}, a\}, b\} + \{a, \{\mathcal{H}, b\}\} \\ &= \{\{a, b\}, \mathcal{H}\} + \{\{\mathcal{H}, a\}, b\} + \{\{b, \mathcal{H}\}, a\} \\ &= 0 \end{aligned}$$

In der vorletzten Zeile wurde verwendet, dass die Funktion  $a$  bzw.  $b$  auf dem Phasenraum, aufgrund der vorausgesetzten Eigenschaft, Erhaltungsgröße zu sein, die entsprechende Bewegungsgleichung löst. Die letzte Zeile liefert unter Beachtung von  $\{f, g\} = -\{g, f\}$  eine Summe von zyklisch vertauschten Poissonklammern, die wegen der Jacobi-Identität identisch Null ist. Damit ist gezeigt:

$$\frac{d}{dt}\{a, b\} = 0, \text{ wenn gilt } \frac{d}{dt}a = 0 = \frac{d}{dt}b$$

Sind  $a$  und  $b$  Erhaltungsgrößen, so gilt insbesondere  $\{a, b\} = \text{const.}$  Damit ist demonstriert, dass es unendlich viele Erhaltungsgrößen gibt, sobald nur zwei bekannt sind, z.B. indem man alle möglichen Poissonklammern bildet. Leider findet man mit diesem Verfahren nicht immer neue, von  $a$  und  $b$  *unabhängige* Erhaltungsgrößen des Systems (sofern welche existieren)! Die Gesamtheit aller Erhaltungsgrößen bildet eine abgeschlossene Algebra bzgl. der Poissonklammer.

### 5.4.3 Drehimpuls

Der Bahn-Drehimpuls eines Teilchens (bezogen auf den Ursprung des Koordinatensystems) ist gegeben zu  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \wedge \mathbf{p}$ , also in kartesischen Koordinaten:

$$\begin{aligned} L_1 &= r_2 p_3 - r_3 p_2 \\ L_2 &= r_3 p_1 - r_1 p_3 \\ L_3 &= r_1 p_2 - r_2 p_1 \end{aligned}$$

Die Poissonklammer von  $L_1$  und  $L_2$  berechnen wir unter Verwendung der fundamentalen Poissonklammern unschwer zu

$$\begin{aligned} \{L_1, L_2\} &= \{r_2 p_3 - r_3 p_2, r_3 p_1 - r_1 p_3\} \\ &= \{r_2 p_3, r_3 p_1\} + \{r_3 p_2, r_1 p_3\} \\ &= -r_2 p_1 + p_2 r_1 = L_3 \end{aligned}$$

Wenn  $L_1$  und  $L_2$  Erhaltungsgrößen sind, dann ist auch  $L_3$  Erhaltungsgröße! Das heißt, sobald zwei Komponenten des Drehimpulses erhalten sind, ist auch die dritte Komponente erhalten!

Ebenso zeigt man unschwer, daß die Poissonklammer des Quadrates des Drehimpulses,  $L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$ , mit jeder Linearkombination der Drehimpulskomponenten  $L_k$  identisch Null ist:

$$\{L_k, L^2\} = 0$$

Für ein Problem mit zwei Freiheitsgraden sei

$$\alpha = \arctan \frac{r_2}{r_1}$$

$$L_3 = r_1 p_2 - r_2 p_1$$

Dann gilt

$$\{\alpha, L_3\} = 1$$

## 5.5 Kanonische Transformationen

Der Hamilton'sche Formalismus erlaubt im Vergleich zum Euler-Lagrange Formalismus, der ja auf dem Konzept der Trajektorie eines Teilchens aufbaut, eine viel größere Flexibilität bei der Wahl von neuen Koordinaten, indem Koordinaten und Impulse als gleichberechtigte unabhängige Variable aufgefasst werden.

Ein 'Zustand' eines Systems, z.B. zur Zeit  $t = 0$ , ist ein Punkt  $\mathbb{X} = (\mathbb{Q}, \mathbb{P})$  des (erweiterten) Phasenraums. Wie wir gesehen haben, legt die Exponentialkonstruktion mittels des Liouville-Operators, ausgehend von einem Zustand  $\mathbb{X}$ , über die Anfangsbedingung  $\mathbb{X}(t = 0) = \mathbb{X}$ , die Evolution des Zustands  $\mathbb{X}$  entlang einer Trajektorie  $\mathbb{X}(t)$  im Phasenraum für spätere Zeiten eindeutig fest:

$$\mathbb{X}(t) = \exp(t\mathcal{L}) \mathbb{X}$$

Dabei wirkt der Liouville-Operator nur lokal, denn zur Bildung der Ableitungen benötigt man lediglich eine kleine Umgebung von  $\mathbb{X}$  im Phasenraum.

Die Struktur der Hamilton'schen Bewegungsgleichungen

$$\dot{\mathbb{Q}}_k = \{\mathbb{Q}_k, \mathbb{H}\} = \frac{\partial \mathbb{H}}{\partial \mathbb{P}_k}$$

$$\dot{\mathbb{P}}_k = \{\mathbb{P}_k, \mathbb{H}\} = -\frac{\partial \mathbb{H}}{\partial \mathbb{Q}_k}$$

legt es nahe, durch geschickte Wahl neuer verallgemeinerter Koordinaten eine möglichst kleine Anzahl von beschreibenden Koordinaten und Impulsen zu erhalten, so dass möglichst viele verallgemeinerte Koordinaten und Impulse des Systems *zyklisch* sind. Denn ist z.B. die Koordinate  $q_j$  zyklisch, dann gilt

$$\dot{p}_j = \{q_j, \mathbb{H}\} = 0$$

d.h. der konjugierte Impuls  $p_j$  ist eine Erhaltungsgröße, insbesondere ist  $p_j(t) = p_j(t = 0) = p_j$ . Oftmals sind viele der verwendeten Koordinaten  $(\mathbb{Q}, \mathbb{P})$  aber *nicht* zyklisch und es muss ein Verfahren zur Transformation der Koordinaten in einen besser geeigneten Satz von neuen Koordinaten gefunden werden. Definiert man neue Variable

$$\tilde{\mathbb{Q}}_k = \tilde{\mathbb{Q}}_k(\mathbb{Q}, \mathbb{P}) \tag{5.7}$$

$$\tilde{\mathbb{P}}_k = \tilde{\mathbb{P}}_k(\mathbb{Q}, \mathbb{P}) \tag{5.8}$$

mit der Eigenschaft, dass die neuen Koordinaten  $(\tilde{Q}, \tilde{P})$  ebenfalls die fundamentalen Poissonklammern

$$\begin{aligned}\{\tilde{Q}_k, \tilde{Q}_l\} &= 0 = \{\tilde{P}_k, \tilde{P}_l\} \\ \{\tilde{Q}_k, \tilde{P}_l\} &= \delta_{kl}\end{aligned}$$

als Wert annehmen, dann existiert eine erzeugende Funktion  $\mathcal{F}_1(Q, \tilde{Q})$  mit der Eigenschaft

$$\mathbb{P}_k = \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial Q_k} \quad (5.9)$$

$$\tilde{\mathbb{P}}_k = -\frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial \tilde{Q}_k}. \quad (5.10)$$

Wegen der Vertauschbarkeit zweier partieller Ableitungen und (5.9) folgt sofort:

$$\frac{\partial \mathbb{P}_k}{\partial Q_j} = \frac{\partial^2 \mathcal{F}_1}{\partial Q_j \partial Q_k} = \frac{\partial^2 \mathcal{F}_1}{\partial Q_k \partial Q_j} = \frac{\partial \mathbb{P}_j}{\partial Q_k} = A_{jk}$$

Die Matrix  $A$  der zweiten Ableitung ist also symmetrisch:  $A = A^T$ . Bildet man jetzt das Differential der alten und neuen Impulse aus (5.9) und (5.10), erhält man den linearen Zusammenhang:

$$\begin{aligned}d\mathbb{P}_k &= \sum_j \left( \frac{\partial^2 \mathcal{F}_1}{\partial Q_j \partial Q_k} dQ_j + \frac{\partial^2 \mathcal{F}_1}{\partial \tilde{Q}_j \partial Q_k} d\tilde{Q}_j \right) \\ -d\tilde{\mathbb{P}}_k &= \sum_j \left( \frac{\partial^2 \mathcal{F}_1}{\partial Q_j \partial \tilde{Q}_k} dQ_j + \frac{\partial^2 \mathcal{F}_1}{\partial \tilde{Q}_j \partial \tilde{Q}_k} d\tilde{Q}_j \right)\end{aligned} \quad (5.11)$$

Für die weiteren Rechnungen ist es einfacher und übersichtlicher, wenn wir die Matrizen der auftretenden zweiten Ableitungen (wie oben schon geschehen) zu

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \mathcal{F}_1}{\partial Q_j \partial Q_k} &= A_{kj} & \frac{\partial^2 \mathcal{F}_1}{\partial \tilde{Q}_j \partial Q_k} &= B_{kj} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{F}_1}{\partial Q_j \partial \tilde{Q}_k} &= C_{jk} & \frac{\partial^2 \mathcal{F}_1}{\partial \tilde{Q}_j \partial \tilde{Q}_k} &= D_{kj}\end{aligned}$$

definieren. Für diese gilt (wiederum wegen der Vertauschbarkeit der Reihenfolge der zweiten Ableitung) die Symmetrie:

$$\begin{aligned}A &= A^T \\ B^T &= C \\ D^T &= D\end{aligned} \quad (5.12)$$

Also:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} A^T & C^T \\ B^T & D^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$$

Es ergibt sich aus (5.11):

$$\begin{aligned}d\mathbb{P} &= AdQ + Bd\tilde{Q} \\ -d\tilde{\mathbb{P}} &= CdQ + Dd\tilde{Q}\end{aligned}$$

durch elementare Umstellungen die Beziehung

$$\begin{aligned} d\tilde{Q} &= B^{-1}d\mathbb{P} - B^{-1}AdQ \\ d\tilde{\mathbb{P}} &= -CdQ - Dd\tilde{Q} = (-C + DB^{-1}A)dQ - DB^{-1}d\mathbb{P} \end{aligned}$$

Damit lassen sich die Poissonklammer der neuen Variablen leicht berechnen:

$$\begin{aligned} \{\tilde{Q}_j, \tilde{Q}_k\} &= \sum_m \left( \frac{\partial \tilde{Q}_j}{\partial Q_m} \frac{\partial \tilde{Q}_k}{\partial \mathbb{P}_m} - \frac{\partial \tilde{Q}_j}{\partial \mathbb{P}_m} \frac{\partial \tilde{Q}_k}{\partial Q_m} \right) \\ &= \sum_m (-B^{-1}A)_{jm} (B^{-1})_{km} - (B^{-1})_{jm} (-B^{-1}A)_{km} \\ &= [-B^{-1}A(B^{-1})^T + B^{-1}(B^{-1}A)^T]_{jk} \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \{\tilde{Q}_j, \tilde{\mathbb{P}}_k\} &= \sum_m \left( \frac{\partial \tilde{Q}_j}{\partial Q_m} \frac{\partial \tilde{\mathbb{P}}_k}{\partial \mathbb{P}_m} - \frac{\partial \tilde{Q}_j}{\partial \mathbb{P}_m} \frac{\partial \tilde{\mathbb{P}}_k}{\partial Q_m} \right) \\ &= \sum_m [(-B^{-1}A)_{jm} (-DB^{-1})_{km} - (B^{-1})_{jm} (-C + DB^{-1}A)_{km}] \\ &= [B^{-1}A(B^{-1})^T D^T + B^{-1}C^T - B^{-1}A^T (B^{-1})^T D^T]_{jk} \\ &= (B^{-1}C^T)_{jk} \\ &= (B^{-1}B)_{jk} \\ &= \delta_{jk} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \{\tilde{\mathbb{P}}_j, \tilde{\mathbb{P}}_k\} &= \sum_m \left( \frac{\partial \tilde{\mathbb{P}}_j}{\partial Q_m} \frac{\partial \tilde{\mathbb{P}}_k}{\partial \mathbb{P}_m} - \frac{\partial \tilde{\mathbb{P}}_j}{\partial \mathbb{P}_m} \frac{\partial \tilde{\mathbb{P}}_k}{\partial Q_m} \right) \\ &= \sum_m (-C + DB^{-1}A)_{jm} (-DB^{-1})_{km} - (-DB^{-1})_{jm} (-C + DB^{-1}A)_{km} \\ &= [(-C + DB^{-1}A) (-DB^{-1})^T + (DB^{-1}) (-C + DB^{-1}A)^T] \\ &= 0, \end{aligned}$$

wobei mehrfach die Symmetrierelationen (5.12) ausgenutzt wurden.

Fazit: Die neuen, mittels der erzeugenden Funktion  $\mathcal{F}_1(Q, \tilde{Q})$  generierten kanonischen Variablen  $\tilde{Q}_k$  und  $\tilde{\mathbb{P}}_k$  erfüllen die gleichen fundamentalen Poissonklammern wie die ursprünglichen Variablen  $Q_k$  und  $\mathbb{P}_k$ .

Die Existenz einer erzeugenden Funktion  $\mathcal{F}_1(Q, \tilde{Q})$  mit den Eigenschaften (5.9) und (5.10) zur Generierung neuer verallgemeinerten Koordinaten und Impulsen gemäß (5.7) und (5.8), die die fundamentalen Poissonklammern erhalten, erlaubt es den Schluss umzukehren. Führt man mit  $\tilde{Q}_k = \tilde{Q}_k(Q, \mathbb{P})$  und  $\tilde{\mathbb{P}}_k = \tilde{\mathbb{P}}_k(Q, \mathbb{P})$  neue Koordinaten mit der Eigenschaft

$$\begin{aligned} \{\tilde{Q}_k, \tilde{Q}_j\} &= 0 = \{\tilde{\mathbb{P}}_k, \tilde{\mathbb{P}}_j\} \\ \{\tilde{Q}_k, \tilde{\mathbb{P}}_j\} &= \delta_{kj} \end{aligned}$$

ein, so existiert, wie wir zeigen werden, eine erzeugende Funktion  $\mathcal{F}_1(Q, \tilde{Q})$  mit den Eigenschaften (5.9) und (5.10).

Sei

$$\begin{aligned} W_{kj} &= \frac{\partial \tilde{Q}_k}{\partial Q_j} & F_{kj} &= \frac{\partial \tilde{Q}_k}{\partial \mathbb{P}_j} \\ G_{kj} &= \frac{\partial \tilde{\mathbb{P}}_k}{\partial Q_j} & K_{kj} &= \frac{\partial \tilde{\mathbb{P}}_k}{\partial \mathbb{P}_j} \end{aligned}$$

Dann folgt für die Differentiale in kompakter Matrixnotation:

$$\begin{aligned} d\tilde{Q} &= WdQ + Fd\mathbb{P} \\ d\tilde{\mathbb{P}} &= GdQ + Kd\mathbb{P} \end{aligned}$$

Aus den Forderungen  $\{\tilde{Q}_j, \tilde{Q}_k\} = 0 = \{\tilde{\mathbb{P}}_j, \tilde{\mathbb{P}}_k\}$  und  $\{\tilde{Q}_j, \tilde{\mathbb{P}}_k\} = \delta_{jk}$  ergeben sich Bedingungen an die  $\tilde{M} \times \tilde{M}$  Matrizen  $W$ ,  $F$ ,  $G$  und  $K$ :

$$\begin{aligned} 0 \stackrel{!}{=} \{\tilde{Q}_j, \tilde{Q}_k\} &= \sum_m \left( \frac{\partial \tilde{Q}_j}{\partial Q_m} \frac{\partial \tilde{Q}_k}{\partial \mathbb{P}_m} - \frac{\partial \tilde{Q}_j}{\partial \mathbb{P}_m} \frac{\partial \tilde{Q}_k}{\partial Q_m} \right) \\ &= \sum_m (W_{jm} F_{km} - F_{jm} W_{km}) \\ &= (WF^T - FW^T)_{jk}, \end{aligned}$$

oder

$$WF^T = FW^T = (WF^T)^T$$

Analog erhalten wir aus

$$\delta_{j,k} \stackrel{!}{=} \{\tilde{Q}_j, \tilde{\mathbb{P}}_k\} = (WK^T - FG^T)_{jk}$$

sofort

$$\begin{aligned} WK^T &= \mathbf{1} + FG^T \\ KW^T &= \mathbf{1} + GF^T \end{aligned}$$

Entsprechend liefert die Forderung

$$0 \stackrel{!}{=} \{\tilde{\mathbb{P}}_j, \tilde{\mathbb{P}}_k\} = (GK^T - KG^T)_{jk}$$

die notwendige Bedingung

$$GK^T = KG^T = (GK^T)^T.$$

Auflösen nach  $d\mathbb{P}$  und  $d\tilde{\mathbb{P}}$  liefert dann die Relation

$$\begin{aligned} d\mathbb{P} &= F^{-1}d\tilde{Q} - F^{-1}WdQ \stackrel{!}{=} AdQ + Bd\tilde{Q} \\ d\tilde{\mathbb{P}} &= (G - KF^{-1}W)dQ + KF^{-1}d\tilde{Q} \stackrel{!}{=} -CdQ - Dd\tilde{Q} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} d\mathbb{P} \\ -d\tilde{\mathbb{P}} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -F^{-1}W, & F^{-1} \\ KF^{-1}W - G, & -KF^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dQ \\ d\tilde{Q} \end{pmatrix} \\ &\equiv \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dQ \\ d\tilde{Q} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Es folgt wegen der bereits festgestellten Symmetrieeigenschaften von  $W, F, G, K$ , nunmehr:

$$\begin{aligned}
 A &= -F^{-1}W = A^T \\
 B &= F^{-1} \\
 C &= KF^{-1}W - G \\
 &= KW^T(F^{-1})^T - G \\
 &= (GF^T + \mathbf{1})(F^{-1})^T - G = (F^{-1})^T \\
 &= B^T
 \end{aligned}$$

Also gelten die Integrabilitätsbedingungen:

$$\left. \begin{aligned} A^T &= A \\ B^T &= C \\ D^T &= D \end{aligned} \right\} \text{ mit } \left\{ \begin{aligned} A_{jk} &= \frac{\partial^2 \mathcal{F}_1}{\partial Q_j \partial Q_k} \\ B_{jk} &= \frac{\partial^2 \mathcal{F}_1}{\partial \tilde{Q}_j \partial \tilde{Q}_k} = C_{kj} \\ D_{jk} &= \frac{\partial^2 \mathcal{F}_1}{\partial Q_j \partial \tilde{Q}_k} \end{aligned} \right.$$

Entsprechend existiert eine Funktion  $\mathcal{F}_1(\mathbb{Q}, \tilde{\mathbb{Q}})$  mit den Eigenschaften (5.9) und (5.10), wie oben behauptet. Die Funktion  $\mathcal{F}_1(\mathbb{Q}, \tilde{\mathbb{Q}})$  nennt man *erzeugende Funktion der kanonischen Transformation*.

### 5.5.1 Symplektische Struktur und Kanonische Transformationen

Wir betrachten allgemeine Abbildungen  $(\tilde{Q}, \tilde{P}) = \tilde{\mathbb{X}} = \mathbb{F}(\mathbb{X}) = \mathbb{F}(\mathbb{Q}, \mathbb{P})$  des (erweiterten) Phasenraums auf sich:

$$\begin{aligned}
 \mathbb{X} &= (\mathbb{Q}, \mathbb{P}) \\
 \mathbb{Q} &= (t, \mathbf{q}) \\
 \mathbb{P} &= (-E, \mathbf{p})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathbb{X}} &= (\tilde{Q}, \tilde{P}) \\
 \tilde{\mathbb{Q}} &= (\tilde{q}_0, \tilde{\mathbf{q}}) \\
 \tilde{\mathbb{P}} &= (\tilde{p}_0, \tilde{\mathbf{p}})
 \end{aligned}$$

(5.13)

$$\begin{aligned}
 \mathbb{H}(\mathbb{X}) &= \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) - E \\
 \tilde{\mathbb{H}}(\tilde{\mathbb{X}}) &= \tilde{\mathcal{H}}(\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{p}}, \tilde{q}_0) + \tilde{p}_0 \dot{\tilde{q}}_0
 \end{aligned}$$

Bereits zu Anfang des Kapitels über Poissonklammern haben wir die schief-symmetrische Matrix  $\varepsilon$  mit

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

zur Abkürzung verwendet. Eine Matrix  $\mathcal{M}$  heisst symplektisch, wenn sie die Eigenschaft

$$\mathcal{M} \varepsilon \mathcal{M}^T = \varepsilon$$

erfüllt.

Wir zeigen jetzt, daß eine Abbildung  $\mathbb{X} \xrightarrow{\mathbb{F}} \tilde{\mathbb{X}}$  des (erweiterten) Phasenraumes in sich mit  $\tilde{\mathbb{X}} = \mathbb{F}(\mathbb{X})$  die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen invariant lassen, wenn die Funktionalmatrix  $M_{ab} = \frac{\partial F_a(\mathbb{X})}{\partial \tilde{\mathbb{X}}_b}$  der abbildenden Funktion  $\mathbb{F}(\mathbb{X})$  *symplektisch* ist:

$$\begin{aligned} d\tilde{\mathbb{X}}_a &= \sum_b \frac{\partial F_a(\mathbb{X})}{\partial \tilde{\mathbb{X}}_b} d\mathbb{X}_b \\ &= \sum_b \mathcal{M}_{ab} d\mathbb{X}_b \\ \begin{pmatrix} d\tilde{\mathbb{Q}} \\ d\tilde{\mathbb{P}} \end{pmatrix} &= \mathcal{M} \cdot \begin{pmatrix} d\mathbb{Q} \\ d\mathbb{P} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Die Variablen  $\mathbb{X}_b$  genügen den Hamilton'schen Bewegungsgleichungen:

$$\dot{\mathbb{X}}_b = \sum_c \varepsilon_{bc} \frac{\partial \mathbb{H}(\mathbb{X})}{\partial \mathbb{X}_c}$$

Dann gibt es eine transformierte Hamiltonfunktion

$$\mathbb{H}(\mathbb{X}) = \mathbb{H}(\mathbb{Q}, \mathbb{P}) = \tilde{\mathbb{H}} \left[ \tilde{\mathbb{Q}}(\mathbb{Q}, \mathbb{P}), \tilde{\mathbb{P}}(\mathbb{Q}, \mathbb{P}) \right] = \tilde{\mathbb{H}}(\tilde{\mathbb{Q}}, \tilde{\mathbb{P}}) = \tilde{\mathbb{H}}[\mathbb{F}(\mathbb{X})] = \tilde{\mathbb{H}}(\tilde{\mathbb{X}}),$$

so dass den neuen Variablen  $\tilde{\mathbb{X}} = (\tilde{\mathbb{Q}}, \tilde{\mathbb{P}})$  entsprechende Bewegungsgleichungen zugeordnet sind. Denn die vermittelnde Abbildung  $\tilde{\mathbb{X}} = \mathbb{F}(\mathbb{X})$  mit Komponenten  $\tilde{\mathbb{X}}_a = F_a(\mathbb{X})$  besitzt als Funktion auf dem (erweiterten) Phasenraum bzgl. der ursprünglichen Hamiltonfunktion  $\mathbb{H}(\mathbb{X})$  die Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt} F_a(\mathbb{X}) = \{F_a(\mathbb{X}), \mathbb{H}(\mathbb{X})\}$$

Also:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\mathbb{X}}_a &= \{\tilde{\mathbb{X}}_a, \mathbb{H}(\mathbb{X})\} = \sum_{b,c} \varepsilon_{bc} \frac{\partial \tilde{\mathbb{X}}_a}{\partial x_b} \frac{\partial \mathbb{H}(\mathbb{X})}{\partial x_c} \\ &= \sum_{b,c} \varepsilon_{bc} \frac{\partial F_a(\mathbb{X})}{\partial \mathbb{X}_b} \sum_{b'} \frac{\partial \tilde{\mathbb{H}}(\tilde{\mathbb{X}})}{\partial \tilde{\mathbb{X}}_{b'}} \frac{\partial F_{b'}(\mathbb{X})}{\partial \mathbb{X}_c} \\ &= \sum_{b,b',c} \frac{\partial F_a(\mathbb{X})}{\partial \mathbb{X}_b} \varepsilon_{bc} \frac{\partial F_{b'}(\mathbb{X})}{\partial \mathbb{X}_c} \frac{\partial \tilde{\mathbb{H}}(\tilde{\mathbb{X}})}{\partial \tilde{\mathbb{X}}_{b'}} \\ &= \sum_{b,b',c} M_{ab} \varepsilon_{bc} M_{b'c} \frac{\partial \tilde{\mathbb{H}}(\tilde{\mathbb{X}})}{\partial \tilde{\mathbb{X}}_{b'}} \\ &= \sum_{b'} (\mathcal{M} \varepsilon \mathcal{M}^T)_{ab'} \frac{\partial \tilde{\mathbb{H}}(\tilde{\mathbb{X}})}{\partial \tilde{\mathbb{X}}_{b'}} \\ &= \sum_{b'} \varepsilon_{ab'} \frac{\partial \tilde{\mathbb{H}}(\tilde{\mathbb{X}})}{\partial \tilde{\mathbb{X}}_{b'}} \\ &= \{\tilde{\mathbb{X}}_a, \tilde{\mathbb{H}}(\tilde{\mathbb{X}})\} \end{aligned}$$

, was zu zeigen war.

Die letzte Gleichung können wir auch umschreiben zu

$$\frac{d}{dt}\tilde{X}_a = \tilde{\mathcal{L}}\tilde{X}_a$$

, wobei  $\tilde{\mathcal{L}}$  jetzt der mit der neuen Hamiltonfunktion  $\tilde{H}(\tilde{X})$  konstruierte Liouville Operator ist. Also gilt für eine beliebige Funktion  $A(\tilde{X})$  der neuen Variablen  $\tilde{X} = \mathbb{F}(X)$  die Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}A(\tilde{X}) &= \{A(\tilde{X}), \tilde{H}(\tilde{X})\} \\ &= \tilde{\mathcal{L}}A(\tilde{X})\end{aligned}$$

Diese Bewegungsgleichung ist ihrer *Form* nach *invariant* unter der Transformation  $\tilde{X} = \mathbb{F}(X)$ , vorausgesetzt die Funktionalmatrix  $M_{ab} = \frac{\partial \mathbb{F}_a(X)}{\partial X_b}$  der erzeugenden Funktion  $\mathbb{F}$  ist *symplektisch*! Wir zeigen jetzt, dass eine Kanonische Transformation (im erweiterten Phasenraum) eine symplektische Funktionalmatrix besitzt. Sei

$$\begin{aligned}d\tilde{X}_a &= \sum_b \frac{\partial \mathbb{F}_a(X)}{\partial X_b} dX_b \\ \begin{pmatrix} d\tilde{Q} \\ d\tilde{P} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} W & F \\ G & K \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dQ \\ dP \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Da die Transformation  $\tilde{X} = \mathbb{F}(X)$  kanonisch ist, erfüllen die neuen Variablen  $(\tilde{Q}, \tilde{P})$  die fundamentalen Poissonklammern

$$\begin{aligned}\{\tilde{P}_j, \tilde{P}_k\} &= 0 = \{\tilde{Q}_j, \tilde{Q}_k\} \\ \{\tilde{Q}_j, \tilde{P}_k\} &= \delta_{kj}\end{aligned}$$

Dies impliziert für die Matrizen  $W$ ,  $F$ ,  $G$  und  $K$  die Identitäten:

$$\begin{aligned}WF^T - FW^T &= 0 \\ -FG^T + WK^T &= 1 \\ -KW^T + GF^T &= -1 \\ -KG^T + GK^T &= 0\end{aligned}$$

Dann folgt

$$\begin{aligned}&\begin{pmatrix} W & F \\ G & K \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} W & F \\ G & K \end{pmatrix}^T \\ &= \begin{pmatrix} -F & W \\ -K & G \end{pmatrix} \begin{pmatrix} W^T & G^T \\ F^T & K^T \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -FW^T + WF^T & -FG^T + WK^T \\ -KW^T + GF^T & -KG^T + GK^T \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix},\end{aligned}$$

d.h. die Funktionalmatrix  $\frac{\partial \mathbb{F}_a(X)}{\partial X_b} = \begin{pmatrix} W & F \\ G & K \end{pmatrix}_{ab}$  ist symplektisch!



Man kann die Überlegungen auch in der umgekehrten Richtung anstellen und sich davon überzeugen, dass eine Abbildung  $\tilde{\mathbb{X}} = \mathbb{F}(\mathbb{X})$  mit symplektischer Funktionalmatrix  $\frac{\partial \mathbb{F}_a(\mathbb{X})}{\partial \mathbb{X}_b}$  eine Kanonische Transformation beschreibt, d.h. die neuen Variablen  $\tilde{\mathbb{X}} = (\tilde{\mathbb{Q}}, \tilde{\mathbb{P}})$  erfüllen die fundamentalen Poissonklammern.

Im vorhergehenden Kapitel wurden spezielle Kanonische Transformationen anhand einer erzeugenden Funktion  $\mathcal{F}_1(\mathbb{Q}, \tilde{\mathbb{Q}})$  explizit konstruiert, die die alten Koordinaten  $\mathbb{X} = (\mathbb{Q}, \mathbb{P})$  in den neuen Koordinatensatz  $\tilde{\mathbb{X}} = (\tilde{\mathbb{Q}}, \tilde{\mathbb{P}})$  überführten. Wir hatten bereits die Invarianz der fundamentalen Poissonklammern für den neuen Koordinatensatz  $\tilde{\mathbb{X}} = (\tilde{\mathbb{Q}}, \tilde{\mathbb{P}})$  gezeigt. Damit ist die Funktionalmatrix einer durch  $\mathcal{F}_1(\mathbb{Q}, \tilde{\mathbb{Q}})$  erzeugten kanonischen Transformation (im erweiterten Phasenraum) symplektisch. Die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen bleiben demnach beim Übergang auf die neuen Koordinaten  $\tilde{\mathbb{X}} = (\tilde{\mathbb{Q}}, \tilde{\mathbb{P}})$  ihrer Form nach invariant, mit der neuen Hamiltonfunktion  $\tilde{\mathbb{H}}(\tilde{\mathbb{X}}) = \tilde{\mathbb{H}}[\mathbb{F}(\mathbb{X})] = \mathbb{H}(\mathbb{X})$ .

#### Zeitabhängige Kanonische Transformationen $\mathcal{F}_1, \mathcal{F}_2, \mathcal{F}_3$ und $\mathcal{F}_4$ .

Für Probleme mit zeitabhängiger Hamiltonfunktion  $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$  erlaubt das beschriebene Einbettungsverfahren der kanonischen Variablen  $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$  in einen um zwei Freiheitsgrade  $q_0 = t$  und  $p_0 = -E$  erweiterten Phasenraum den Übergang zu einer formal zeitunabhängigen Hamiltonfunktion:

$$\mathbb{H}(\mathbb{X}) = \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, q_0) + p_0 \dot{q}_0 \quad (5.14)$$

In dem Fall wird die Kanonische Transformation

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbb{Q}}_k &= \tilde{\mathbb{Q}}_k(\mathbb{Q}, \mathbb{P}) \\ \tilde{\mathbb{P}}_k &= \tilde{\mathbb{P}}_k(\mathbb{Q}, \mathbb{P}) \end{aligned}$$

nach dem angegebenen Verfahren durch

$$\mathcal{F}_1(\mathbb{Q}, \tilde{\mathbb{Q}}) = (q_0 - \tilde{q}_0) p_0 + \mathcal{F}_1(\mathbf{q}, \tilde{\mathbf{q}}, \tilde{q}_0) \quad (5.15)$$

erzeugt. Es gilt für  $k = 1, 2, \dots, M$ :

$$\begin{aligned} p_k &= \frac{\partial \mathcal{F}_1(\mathbf{q}, \tilde{\mathbf{q}}, \tilde{q}_0)}{\partial q_k} \\ \tilde{p}_k &= -\frac{\partial \mathcal{F}_1(\mathbf{q}, \tilde{\mathbf{q}}, \tilde{q}_0)}{\partial \tilde{q}_k} \end{aligned}$$

und für  $k = 0$ :

$$\begin{aligned} p_0 &= \frac{\partial \mathcal{F}_1(\mathbb{Q}, \tilde{\mathbb{Q}})}{\partial q_0} = -E \\ q_0 &= t \\ \tilde{p}_0 &= -\frac{\partial \mathcal{F}_1(\mathbb{Q}, \tilde{\mathbb{Q}})}{\partial \tilde{q}_0} = -E - \frac{\partial \mathcal{F}_1(\mathbf{q}, \tilde{\mathbf{q}}, \tilde{q}_0)}{\partial \tilde{q}_0} \\ \tilde{q}_0 &= t \end{aligned} \quad (5.16)$$

Welcher Zusammenhang besteht jetzt zwischen der alten Hamiltonfunktion  $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, q_0)$  und der neuen Hamiltonfunktion  $\tilde{\mathcal{H}}(\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{p}}, \tilde{q}_0)$ ? Das beschriebene Einbettungsverfahren geht von der Identifizierung

$$\tilde{\mathbb{H}}(\tilde{\mathbb{Q}}, \tilde{\mathbb{P}}) = \tilde{\mathcal{H}}(\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{p}}, \tilde{q}_0) + \tilde{p}_0 \dot{\tilde{q}}_0 \quad (5.17)$$

aus. Da es sich um eine Kanonische Transformation im erweiterten Phasenraum handelt gilt notwendig:

$$\tilde{\mathbb{H}}(\tilde{\mathbb{Q}}, \tilde{\mathbb{P}}) = \tilde{\mathbb{H}} \left[ \tilde{\mathbb{Q}}(\mathbb{Q}, \mathbb{P}), \tilde{\mathbb{P}}(\mathbb{Q}, \mathbb{P}) \right] = \mathbb{H}(\mathbb{Q}, \mathbb{P}) \quad (5.18)$$

Diese Forderung ist äquivalent zu

$$\tilde{\mathcal{H}}(\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{p}}, \tilde{q}_0) + \tilde{p}_0 \dot{\tilde{q}}_0 = \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, q_0) + p_0 \dot{q}_0 \quad (5.19)$$

Einsetzen des Terms für  $\tilde{p}_0$  in (5.16) liefert mit  $\tilde{q}_0 = t = q_0$  und  $\tilde{p}_0 = p_0 - \frac{\partial \mathcal{F}_1(\mathbf{q}, \tilde{\mathbf{q}}, t)}{\partial t}$  die Beziehung:

$$\tilde{\mathcal{H}}(\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{p}}, t) = \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) + \frac{\partial \mathcal{F}_1(\mathbf{q}, \mathbf{Q}, t)}{\partial t} \quad (5.20)$$

<p><b>Typ 1:</b> <math>F_1 = F_1(q, Q, t)</math></p> $p_k = \frac{\partial F_1}{\partial q_k}$ $P_k = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_k}$ $\tilde{H} = H + \frac{\partial F_1(q, Q, t)}{\partial t}$	<p><b>Typ 2:</b> <math>F_2 = F_2(q, P, t)</math></p> $P_k = \frac{\partial F_2}{\partial q_k}$ $Q_k = \frac{\partial F_2}{\partial P_k}$ $\tilde{H} = H + \frac{\partial F_2(q, P, t)}{\partial t}$
<hr style="width: 100%;"/>	
<p><b>Typ 3:</b> <math>F_3 = F_3(Q, p, t)</math></p> $q_k = -\frac{\partial F_3}{\partial p_k}$ $P_k = -\frac{\partial F_3}{\partial Q_k}$ $\tilde{H} = H + \frac{\partial F_3(p, Q, t)}{\partial t}$	<p><b>Typ 4:</b> <math>F_4 = F_4(p, P, t)</math></p> $q_k = -\frac{\partial F_4}{\partial p_k}$ $Q_k = \frac{\partial F_4}{\partial P_k}$ $\tilde{H} = H + \frac{\partial F_4(p, P, t)}{\partial t}$

Abbildung 5.1: Erzeugende Funktionen

Die für die erzeugende Funktion  $\mathcal{F}_1(\mathbb{Q}, \tilde{\mathbb{Q}})$  in den vorgestellten Abschnitten angestellten Betrachtungen sind völlig analog auf drei weitere Typen von erzeugenden Funktionen übertragbar. Die entsprechenden Einzelheiten sind in der Tabelle zusammengefasst.

Wir haben in den vorangestellten Abschnitten gezeigt, dass kanonische Transformationen des (erweiterten) Phasenraums auf sich eine symplektische Funktionalmatrix haben, und dass sich die fundamentalen Poissonklammern unter einer kanonischen Transformation invariant transformieren. Es ist nicht so einfach, Transformationen des Phasenraums auf sich mit den Eigenschaften einer Kanonischen Transformation zu finden. Deshalb ist man bei der systematischen Konstruktion von neuen Kanonischen Transformationen in der Praxis auf die Methode der erzeugenden Funktionen  $\mathcal{F}_1$ ,  $\mathcal{F}_2$ ,  $\mathcal{F}_3$  und  $\mathcal{F}_4$  angewiesen!

## 5.6 Beispiele für Kanonische Transformationen

Im Folgenden geben wir mehrere Beispiele für Kanonische Transformationen.

### Vertauschung von Koordinaten und Impulsen

Sei

$$F_1(q, Q) = \sum_j q_j Q_j$$

eine Typ-1-Erzeugende-Funktion. Dann folgt sofort

$$\begin{aligned} p_k &= \frac{\partial F_1}{\partial q_k} = Q_k \\ P_k &= -\frac{\partial F_1}{\partial Q_k} = -q_k \end{aligned}$$

Der „alte“ Impuls ist die „neue“ Lagekoordinate und der „neue“ Impuls ist das Negative der „alten“ Lagekoordinate. Durch die Transformation erzielt man ein Vertauschen der „Impulse“ mit den „Lagekoordinaten“.

### Transformation auf drehendes Koordinatensystem

Die Drehmatrix<sup>4</sup> für eine (starre) Rotation um die Achse  $\mathbf{e}_3$  ist

$$D_{\alpha,\beta}(t) = \begin{pmatrix} \cos \phi(t) & \sin \phi(t) & 0 \\ -\sin \phi(t) & \cos \phi(t) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{\alpha,\beta}$$

wobei  $\alpha, \beta \in \{1, 2, 3\}$ . Als Erzeugende der entsprechenden kanonischen Transformation betrachten wir eine Typ-2-Erzeugende

$$F_2(q, P) = \sum_j \sum_{\mu,\nu} P_{j,\mu} D_{\mu,\nu}(t) q_{j,\nu}$$

Sei  $q_{j,\alpha}$  die  $\alpha$ -Komponente der Lagekoordinate des  $j$ -ten Teilchens in einem Inertialsystem. Gemäß der Regeln für Typ 2-Erzeugende-Funktionen ergibt sich für die Koordinaten und Impulse im rotierenden System der Ausdruck

$$\begin{aligned} Q_{k,\alpha}(t) &= \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial P_{k,\alpha}} = \sum_{\nu=1}^3 D_{\alpha,\nu}(t) q_{k,\nu}(t) \\ P_{k,\alpha}(t) &= \frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial q_{k,\alpha}} = \sum_{\mu=1}^3 D_{\mu,\alpha}(t) P_{k,\mu} \end{aligned}$$

Somit können wir unmittelbar die neue Hamiltonfunktion des rotierenden Systemes angeben:

$$\begin{aligned} \widetilde{\mathcal{H}}(Q, P) &= \mathcal{H}(q, p) + \frac{\partial}{\partial t} F_2(q, P, t) \\ &= \mathcal{H}(q, p) + \sum_j \sum_{\mu,\nu} P_{j,\mu} \dot{D}_{\mu,\nu}(t) q_{j,\nu} \end{aligned}$$

<sup>4</sup>Die Drehmatrix stellt eine orthogonale Transformation im dreidimensionalen Raum dar:

$$D \cdot D^T = 1 = D^T \cdot D$$

Einsetzen von  $q_{j,\nu}$  ausgedrückt durch  $Q_{j,\alpha}$  ergibt wegen

$$\sum_{\nu=1}^3 D_{\mu,\nu}(t) D_{\gamma,\nu}(t) = [D(t) D^T(t)]_{\mu\gamma} = \delta_{\mu\gamma} \quad (5.21)$$

folgende Hamiltonfunktion:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H}(q, p) + \sum_j \sum_{\mu,\nu,\gamma} P_{j,\mu} \dot{D}_{\mu,\nu}(t) \cdot D_{\gamma,\nu}(t) \cdot Q_{j,\gamma}$$

In einer Nebenrechnung wird der Term

$$\sum_{\nu} \dot{D}_{\mu,\nu} \cdot D_{\gamma,\nu} = [\dot{D} \cdot D^T]_{\mu,\gamma}$$

berechnet werden. Matrixmultiplikation ergibt:

$$\dot{D} \cdot D^T = \dot{\phi} \cdot \begin{pmatrix} -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ -\cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix} \quad (5.22)$$

$$= \dot{\phi} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \sin^2 \phi + \cos^2 \phi & 0 \\ -\cos^2 \phi - \sin^2 \phi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \dot{\phi} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.23)$$

Man erhält für die neue Hamiltonfunktion den Ausdruck

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H} + \dot{\phi}(t) \cdot \sum_j (P_{j,1} Q_{j,2} - P_{j,2} Q_{j,1})$$

Es lohnt sich, die Summe näher zu betrachten. Man erkennt darin den negativen Wert der 3-Komponente des Drehimpulses des  $j$ -ten Teilchens:

$$L_{j,3} = Q_{j,1} P_{j,2} - Q_{j,2} P_{j,1} = [\mathbf{Q}_j \wedge \mathbf{P}_j]_3$$

Dies ist die Komponente des Drehimpulses des  $j$ -ten Teilchens parallel zur Drehachse  $\mathbf{e}_3$ . Für eine Winkelgeschwindigkeit

$$\begin{aligned} \omega(t) &= \dot{\phi}(t) \\ \omega &= \omega \cdot \mathbf{e}_3 \end{aligned}$$

erhält man die Hamiltonfunktionen  $\tilde{\mathcal{H}}$  des rotierenden Systemes zu

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H} - \langle \omega, \mathbf{L} \rangle \quad (5.24)$$

Betrachten wir speziell die Hamiltonfunktion eines Teilchens im Potential einer konservativen Kraft im ursprünglichen Inertialsystem.

$$\mathcal{H}(q, p) = \frac{\langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle}{2m} + V(|\mathbf{q}|)$$

Der Zusammenhang zwischen den konjugierten Variablen  $\mathbf{q}$  und  $\mathbf{p}$  im Inertialsystem zwischen den entsprechenden konjugierten Variablen im rotierenden Koordinatensystem ergibt sich über die Drehmatrix  $D(t)$  zu

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= D^T \mathbf{Q} \\ \mathbf{p} &= D^T \mathbf{P} \end{aligned}$$

Das Skalarprodukt ist invariant unter Drehung (orthogonale Transformation!), also erhält man

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle &= \langle D^T \mathbf{P}, D^T \mathbf{P} \rangle = \langle \mathbf{P}, DD^T \mathbf{P} \rangle = \langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle \\ V(|\mathbf{q}|) &= V(\sqrt{\langle \mathbf{q}, \mathbf{q} \rangle}) = V(\sqrt{\langle \mathbf{Q}, \mathbf{Q} \rangle}) = V(|\mathbf{Q}|)\end{aligned}$$

Damit ergibt sich die transformierte Hamiltonfunktion zu

$$\begin{aligned}\widetilde{\mathcal{H}} &= \underbrace{\frac{\langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle}{2m}}_{=\mathcal{H}[q(Q,P),p(Q,P),t]} + V(|\mathbf{Q}|) - \langle \boldsymbol{\omega}(t), \mathbf{L} \rangle\end{aligned}$$

wobei  $\mathbf{L} = \mathbf{Q} \wedge \mathbf{P}$  der Drehimpuls ist. Die Bewegungsgleichungen sind dann für  $k \in \{1, 2, 3\}$ :

$$\begin{aligned}\dot{Q}_k &= \frac{\partial \widetilde{\mathcal{H}}}{\partial P_k} = \frac{1}{m} P_k - (\boldsymbol{\omega} \wedge \mathbf{Q})_k \\ \dot{P}_k &= -\frac{\partial \widetilde{\mathcal{H}}}{\partial Q_k} = -\frac{\partial V}{\partial Q_k} - (\boldsymbol{\omega} \wedge \mathbf{P})_k\end{aligned}\quad (5.25)$$

Offensichtlich ist der mechanische Impuls  $m\dot{\mathbf{Q}}$  des Teilchens bei der Bewegung im rotierenden Koordinatensystem vom konjugierten Impuls  $\mathbf{P}$  zu unterscheiden:

$$m\dot{\mathbf{Q}} = \mathbf{P} - m(\boldsymbol{\omega} \wedge \mathbf{Q})\quad (5.26)$$

Man erhält jetzt durch Differenzieren nach der Zeit  $t$ :

$$\begin{aligned}m\ddot{\mathbf{Q}} &= \ddot{\mathbf{P}} - m(\dot{\boldsymbol{\omega}} \wedge \mathbf{Q}) - m(\boldsymbol{\omega} \wedge \dot{\mathbf{Q}}) \\ &= -\nabla_Q V - (\boldsymbol{\omega} \wedge \mathbf{P}) - m\dot{\boldsymbol{\omega}} \wedge \mathbf{Q} - m\boldsymbol{\omega} \wedge \dot{\mathbf{Q}} \\ &= -\nabla_Q V - \boldsymbol{\omega} \wedge (m\dot{\mathbf{Q}} + m\boldsymbol{\omega} \wedge \mathbf{Q}) - m\dot{\boldsymbol{\omega}} \wedge \mathbf{Q} - m\boldsymbol{\omega} \wedge \dot{\mathbf{Q}}\end{aligned}$$

Dies ist die Bewegungsgleichung eines Teilchens in einem rotierenden Koordinatensystem:

$$m\ddot{\mathbf{Q}} = -\nabla_Q V - 2m\boldsymbol{\omega} \wedge \dot{\mathbf{Q}} - m\dot{\boldsymbol{\omega}} \wedge \mathbf{Q} - m\boldsymbol{\omega} \wedge (\boldsymbol{\omega} \wedge \mathbf{Q})$$

Alle Terme in dieser Bewegungsgleichung sind bekannt. Der erste Term ist die eigentliche Kraft auf das Teilchen, verursacht durch die Ortsabhängigkeit des Potentials. Der zweite Term ist die Corioliskraft, der dritte Term ist eine Scheinkraft aufgrund der Winkelbeschleunigung und der vierte Term ist die Zentrifugalkraft. Wir erhalten diese (wohlbekannten) Scheinkräfte völlig natürlich aus einer kanonischen Transformation von einem Inertialsystem auf ein drehendes (beschleunigtes) Koordinatensystem.

### Anwendung: Ostablenkung beim freien Fall

Der in Bremen stehende Fallturm eignet sich für Kurzzeit-Experimente in Schwerelosigkeit. Da die Erde ein drehendes System ist, wirkt auf ein fallendes Objekt eine Scheinkraft, so dass das fallende Objekt (für einen fest auf der Erde stehenden Beobachter) eine Ostablenkung erfährt. Diese wollen wir nun errechnen. Ein kartesisches Koordinatensystem sei auf der sich drehenden Erdoberfläche wie folgt gewählt:  $\mathbf{e}_1$  zeigt nach Osten,  $\mathbf{e}_2$  zeigt nach Norden,  $\mathbf{e}_3$  zeigt nach oben. Außerdem befinden wir uns am Standort des Fallturmes auf der geographischen Breite  $\theta$ . Der Richtungsvektor der Winkelgeschwindigkeit der Erde ist vom Koordinatensystem des Fallturms aus gesehen

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\omega} &= \omega \mathbf{e}_\omega \\ \mathbf{e}_\omega &= \cos \theta \mathbf{e}_2 + \sin \theta \mathbf{e}_3\end{aligned}$$

Zur Berechnung des Effekts ist *Störungsrechnung* adäquat, da wir annehmen dürfen, daß die Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  der Erdrotation klein gegenüber der charakteristischen inversen Fallzeit  $T^{-1}$  im Fallturm ist, also  $\omega T \ll 1$ . Damit folgt für die Bahnkurve des Objektes im homogenen Schwerfeld der Erde mit Erdbeschleunigung  $g$  :

$$\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}^{(0)}(t) + (\omega T) \mathbf{R}^{(1)}(t) + o[(\omega T)^2]$$

Setzt man den Ansatz in die Bewegungsgleichung ein, so liefert dieses Vorgehen eine Hierarchie von Gleichungen in nullter Ordnung, erster Ordnung, usw., gegliedert nach aufsteigenden Potenzen des kleinen Parameters  $\omega T$ .

$$\begin{aligned} \mathbf{0} &= \begin{cases} m \left[ \ddot{\mathbf{R}}^{(0)}(t) + (\omega T) \ddot{\mathbf{R}}^{(1)}(t) + o[(\omega T)^2] \right] + mg\mathbf{e}_3 \\ + 2m\omega \wedge \left[ \dot{\mathbf{R}}^{(0)}(t) + (\omega T) \dot{\mathbf{R}}^{(1)}(t) + o[(\omega T)^2] \right] \\ + m\omega \wedge (\omega \wedge \left[ \mathbf{R}^{(0)}(t) + (\omega T) \mathbf{R}^{(1)}(t) + o[(\omega T)^2] \right]) \end{cases} \\ &= m \left[ \ddot{\mathbf{R}}^{(0)}(t) + g\mathbf{e}_3 \right] + (\omega T) \left[ m\ddot{\mathbf{R}}^{(1)}(t) + \frac{2m}{T} \frac{\omega}{|\omega|} \wedge \dot{\mathbf{R}}^{(0)}(t) \right] + (\omega T)^2 \end{aligned}$$

In der nullten Ordnung und in der ersten Ordnung ergeben sich somit die Differentialgleichungen:

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{R}}^{(0)}(t) + g\mathbf{e}_3 &= \mathbf{0} \\ \ddot{\mathbf{R}}^{(1)}(t) + \frac{2}{T} \frac{\omega}{|\omega|} \wedge \dot{\mathbf{R}}^{(0)}(t) &= \mathbf{0} \end{aligned}$$

Die Lösung für eine zur Zeit  $t = 0$  ruhende Masse, die aus einer Höhe  $R_3(0) = H$  im Fallturm losgelassen wird, lautet:

$$\mathbf{R}^{(0)}(t) = \left( H - \frac{g}{2}t^2 \right) \mathbf{e}_3 \quad (5.27)$$

Einsetzen liefert eine inhomogene Differentialgleichung für die Korrektur  $\mathbf{R}^{(1)}(t)$  :

$$\ddot{\mathbf{R}}^{(1)}(t) = -\frac{2}{T} \mathbf{e}_\omega \wedge [-gt\mathbf{e}_3] = \frac{2g}{T} t \cos \theta \mathbf{e}_1 \quad (5.28)$$

Die entsprechenden Lösung, die zu den vorgegebenen Anfangsbedingungen passt, lautet

$$\mathbf{R}^{(1)}(t) = \frac{g}{T} \frac{t^3}{3} \cos \theta \mathbf{e}_1 \quad (5.29)$$

Zusammengesetzt erhalten wir das Resultat:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}(t) &= \mathbf{R}^{(0)}(t) + (\omega T) \mathbf{R}^{(1)}(t) + (\omega^2 T^2) \mathbf{R}^{(2)}(t) + \dots \\ &= \left( H - \frac{g}{2}t^2 \right) \mathbf{e}_3 + \frac{\omega g \cos \theta}{3} t^3 \mathbf{e}_1 + o(\omega^2 T^2) \end{aligned}$$

Der zweite Term beschreibt die gesuchte Ostablenkung der fallenden Masse. Der erste Term bestimmt die charakteristische Fallzeit (näherungsweise) zu  $T = \sqrt{\frac{2H}{g}}$ . Für die Parameter der Erde sind somit die quadratischen Korrekturterme proportional  $\omega^2 T^2$  zur Trajektorie des fallenden Teilchens vernachlässigbar klein! Am Äquator ( $\theta = 0^\circ$ ) ist der Effekt der Ostablenkung erwartungsgemäß am Größten.

### Beschleunigtes Koordinatensystem

Wir betrachten jetzt eine Kanonische Transformation, die von einem gegebenen Inertialsystem auf ein geradlinig beschleunigtes Bezugssystem transformiert und die durch eine  $F_2$ -Erzeugende generiert ist:

$$F_2(\mathbf{r}, \mathbf{P}, t) = \langle \mathbf{P}, \mathbf{r} - \mathbf{s}(t) \rangle$$

Hier ist  $\mathbf{s}(t)$  ein homogener, zeitlich veränderlicher Shift des beschleunigten Koordinatensystems relativ zum vorgegebenen Inertialsystem. Die ursprüngliche Hamiltonfunktion (d.h. die Hamiltonfunktion vor der Transformation) eines Teilchens sei zu

$$\mathcal{H} = \frac{\langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle}{2m} + V(\mathbf{r})$$

gegeben. Dies ist die Hamiltonfunktion eines freien Teilchens der Masse  $m$ , das sich in einem Potential  $V$  bewegt. Die neuen Koordinaten im geradlinig beschleunigten Bezugssystem ergeben sich aus der erzeugenden Transformation zu

$$\begin{aligned} R_\beta &= \frac{\partial F_2}{\partial P_\beta} = r_\beta - s_\beta(t) \\ r_\beta &= R_\beta + s_\beta(t) \\ p_\beta &= \frac{\partial F_2}{\partial r_\beta} = P_\beta \end{aligned}$$

Damit lässt sich die neue Hamiltonfunktion  $\tilde{\mathcal{H}}(R, P, t)$  schreiben als

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{R}, \mathbf{P}) &= \frac{\langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle}{2m} + V(\mathbf{R} + \mathbf{s}(t)) + \frac{\partial F_2}{\partial t} \\ &= \frac{\langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle}{2m} + V(\mathbf{R} + \mathbf{s}(t)) - \langle \mathbf{P}, \dot{\mathbf{s}}(t) \rangle \\ &\Rightarrow \tilde{H} = H - \langle \mathbf{v}, \mathbf{P} \rangle \end{aligned}$$

wobei  $\mathbf{v}$  eine *instantane* Geschwindigkeit  $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{s}}(t)$  des beschleunigten Bezugssystems relativ zum gegebenen Inertialsystem darstellt. Durch die Bewegung relativ zum vorgegebenen Inertialsystem entsteht ein charakteristischer Shift in der Energie.

Betrachten wir die Bewegungsgleichungen. Die ursprünglichen Bewegungsgleichungen für den Beobachter  $B$  im ursprünglichen Inertialsystem (kartesische Koordinaten) lauten

$$\begin{aligned} \dot{r}_\alpha &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\alpha} \\ \dot{p}_\alpha &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial r_\alpha} \\ m\ddot{r}_\alpha &= -\frac{\partial V}{\partial R_\alpha} \end{aligned}$$

Im beschleunigten System befinde sich nun ein Beobachter  $\tilde{B}$ . Die Bewegungsgleichungen, die dieser Beobachter zur Beschreibung der Kinematik eines Teilchens von seinem Standpunkt aus

verwendet, sind:

$$\begin{aligned}\dot{R}_\alpha &= \frac{\partial \widetilde{\mathcal{H}}}{\partial P_\alpha} \\ \dot{P}_\alpha &= -\frac{\partial \widetilde{\mathcal{H}}}{\partial R_\alpha} \\ m\ddot{R}_\alpha &= -\frac{\partial V}{\partial R_\alpha} - m\ddot{s}_\alpha(t)\end{aligned}$$

Das heißt, im mitbewegten System registriert ein Beobachter  $\tilde{B}$  neben der Kraft  $-\nabla_R V(\mathbf{R} + \mathbf{s})$  eine inertielle Scheinkraft<sup>5</sup>.

$$\mathbf{F}_s = -m\ddot{\mathbf{s}}(t)$$

Für *nicht-inertielle* Bewegungen, die aus Translationen  $\mathbf{s}(t)$  und Drehungen

$$D(t) = D_{\alpha,\beta}[\Theta(t), \hat{n}(t)]$$

zusammengesetzt sind, ergibt sich die Hamiltonfunktion  $\tilde{H}$  für den mitbewegten Beobachter nach dem Gesagten zu

$$\widetilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H} - \langle \mathbf{v}, \mathbf{P} \rangle - \langle \boldsymbol{\omega}, \mathbf{L} \rangle$$

Hier ist  $\mathbf{v}(t) = \dot{\mathbf{s}}(t)$  die *instantane* Geschwindigkeit und  $\boldsymbol{\omega}(t) = \dot{\Theta}(t) \cdot \hat{n}(t)$  die instantane Winkelgeschwindigkeit um eine (instantane) Drehachse  $\hat{n}(t)$ , wobei  $\boldsymbol{\omega} = \dot{\Theta}$ . Nach wie vor ist  $\mathbf{P}$  der Impuls und  $\mathbf{L} \equiv \mathbf{R} \wedge \mathbf{P}$  der Drehimpuls.

### Zweikörperproblem und Erhaltungsgrößen

Zwei Massenpunkte  $m_1$  und  $m_2$  seien durch eine Hamiltonfunktion der Form

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \frac{\langle \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_1 \rangle}{2m_1} + \frac{\langle \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_2 \rangle}{2m_2} + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$$

beschrieben. Offensichtlich ist diese Hamiltonfunktion nur von der Differenz der kartesischen Lagekoordinaten  $\mathbf{r}_1$  und  $\mathbf{r}_2$  abhängig. Wir suchen neue Koordinaten

$$\begin{aligned}\mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{R} &= u_1 \mathbf{r}_1 + u_2 \mathbf{r}_2\end{aligned}$$

mit zwei unbestimmten Parametern  $u_1$  und  $u_2$ , sowie eine von  $u_1$  und  $u_2$  abhängige Erzeugende Funktion vom Typ  $\mathcal{F}_2$ , um die entsprechende Kanonische Transformation zu finden, die unser Problem vereinfacht:

$$\mathcal{F}_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}, \mathbf{P}) = \langle \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \mathbf{p} \rangle + \langle u_1 \mathbf{r}_1 + u_2 \mathbf{r}_2, \mathbf{P} \rangle$$

Gemäß den Regeln für Erzeugende Funktionen vom Typ  $\mathcal{F}_2$  gilt für die neuen Koordinaten  $\mathbf{r}, \mathbf{R}$  und die alten Impulse  $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$  (siehe Tabelle):

$$\begin{aligned}\mathbf{r} &= \nabla_{\mathbf{p}} \mathcal{F}_2 = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{R} &= \nabla_{\mathbf{P}} \mathcal{F}_2 = u_1 \mathbf{r}_1 + u_2 \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{p}_1 &= \nabla_{\mathbf{r}_1} \mathcal{F}_2 = \mathbf{p} + u_1 \mathbf{P} \\ \mathbf{p}_2 &= \nabla_{\mathbf{r}_2} \mathcal{F}_2 = -\mathbf{p} + u_2 \mathbf{P}\end{aligned}$$

<sup>5</sup>Das sind „Trägheitskräfte“. Ein für jeden Studierenden bekanntes Beispiel: Im mitbewegten Koordinatensystem eines anfahrens oder abbremsenden Busses kommt es zu Trägheitskräften, die auf stehende oder sitzende Personen wirken.



Auflösen dieser linearen Gleichungen nach den neuen Impulsen  $\mathbf{p}$  und  $\mathbf{P}$  liefert:

$$\begin{aligned}\mathbf{P} &= \frac{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2}{u_1 + u_2} \\ \mathbf{p} &= \frac{u_2 \mathbf{p}_1 - u_1 \mathbf{p}_2}{u_1 + u_2}\end{aligned}$$

Die neue Hamiltonfunktion  $\widetilde{\mathcal{H}}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{p}, \mathbf{P})$  ergibt sich aus der alten Hamiltonfunktion  $\mathcal{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$  durch Einsetzen, da unsere Erzeugende  $\mathcal{F}_2$  nicht explizit von der Zeit  $t$  abhängt:

$$\begin{aligned}\widetilde{\mathcal{H}}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{p}, \mathbf{P}) &= \frac{\langle \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_1 \rangle}{2m_1} + \frac{\langle \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_2 \rangle}{2m_2} + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \\ &= \frac{\langle \mathbf{p} + u_1 \mathbf{P}, \mathbf{p} + u_1 \mathbf{P} \rangle}{2m_1} + \frac{\langle -\mathbf{p} + u_2 \mathbf{P}, -\mathbf{p} + u_2 \mathbf{P} \rangle}{2m_2} + V(|\mathbf{r}|)\end{aligned}$$

Die Kreuzterme proportional zu  $\langle \mathbf{p}, \mathbf{P} \rangle$  fallen weg, wenn die Parameter  $u_1$  und  $u_2$  geschickt gewählt werden:

$$\begin{aligned}u_1 &= k \cdot m_1 \\ u_2 &= k \cdot m_2\end{aligned}$$

Dabei ist  $k$  noch eine beliebige Konstante (verschieden von Null). Es folgt

$$\begin{aligned}\widetilde{\mathcal{H}}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{p}, \mathbf{P}) &= \frac{\langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle}{2M} + \frac{\langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle}{2m} + V(|\mathbf{r}|) \\ \frac{1}{m} &= \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \text{ (reduzierte Masse)}\end{aligned}$$

Hervorzuheben ist, dass die Masse  $M$  noch einen freien Parameter  $k$  enthält:

$$\frac{1}{M} = \frac{u_1^2}{m_1} + \frac{u_2^2}{m_2} = k^2(m_1 + m_2)$$

Für die *spezielle* Wahl

$$k = \frac{1}{m_1 + m_2}$$

ergibt sich

$$M = m_1 + m_2 \text{ (Schwerpunktsmasse)}$$

und man erhält den üblichen Zusammenhang zwischen Schwerpunkts- und Relativkoordinaten:

$$\mathbf{R} = u_1 \mathbf{r}_1 + u_2 \mathbf{r}_2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{r}_1 + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{r}_2$$

$$\begin{aligned}\mathbf{P} &= \frac{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2}{u_1 + u_2} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \\ \mathbf{p} &= \frac{u_2 \mathbf{p}_1 - u_1 \mathbf{p}_2}{u_1 + u_2} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{p}_1 - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{p}_2\end{aligned}$$

Die neuen Variablen besitzen per constructionem die folgenden fundamentalen Poissonklammern:

$$\begin{aligned}\{r_m, r_n\} &= 0 = \{p_m, p_n\} \\ \{r_m, p_n\} &= \delta_{m,n}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\{R_m, R_n\} &= 0 = \{P_m, P_n\} \\
\{R_m, P_n\} &= \delta_{m,n} \\
\{R_m, r_n\} &= 0 = \{R_m, p_n\} \\
\{P_m, r_n\} &= 0 = \{P_m, p_n\}
\end{aligned}$$

Die neue Hamiltonfunktion  $\widetilde{\mathcal{H}}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{p}, \mathbf{P})$  hängt nicht explizit von der Variablen  $\mathbf{R}$  ab, d.h. es gilt  $\dot{\mathbf{P}} = \mathbf{0}$  bzw.  $\mathbf{P} = \text{const.}$ , d.h. der Gesamtimpuls ist eine Erhaltungsgröße.

Desgleichen zeigt man unmittelbar die Erhaltung des Gesamtdrehimpulses  $\mathbf{L} = \mathbf{R} \wedge \mathbf{P}$ . Unter Verwendung der fundamentalen Poissonklammern folgt die Hamilton'sche Bewegungsgleichung für die Drehimpulskomponente  $L_j = \sum_{l,m} \varepsilon_{jlm} R_l P_m$ :

$$\begin{aligned}
\dot{L}_j &= \left\{ L_j, \widetilde{\mathcal{H}} \right\} \\
&= \left\{ L_j, \frac{\langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle}{2M} + \frac{\langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle}{2m} + V(|\mathbf{r}|) \right\} \\
&= \sum_{n,m} \varepsilon_{jnm} \left\{ R_n P_m, \frac{\langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle}{2M} \right\} \\
&= \frac{1}{2M} \sum_{k,n,m} \varepsilon_{jnm} P_m \{R_n, P_k^2\} \\
&= \frac{1}{M} \sum_{k,n,m} \varepsilon_{jnm} P_m P_k \delta_{k,n} \\
&= \frac{1}{M} \sum_{n,m} \varepsilon_{jnm} P_m P_n \\
&= 0
\end{aligned}$$

Damit ist  $\mathbf{L} = \text{const.}$ , d.h.  $\mathbf{L}$  ist Erhaltungsgröße.

Für die Bewegungsgleichung des relativen Drehimpulses  $\mathbf{l} = \mathbf{r} \wedge \mathbf{p}$  erhalten wir:

$$\begin{aligned}
\dot{l}_j &= \left\{ l_j, \widetilde{\mathcal{H}} \right\} \\
&= \left\{ l_j, \frac{\langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle}{2M} + \frac{\langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle}{2m} + V(|\mathbf{r}|) \right\} \\
&= \sum_{n,k} \varepsilon_{jnk} \left\{ r_n p_k, \frac{\langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle}{2m} + V(|\mathbf{r}|) \right\} \\
&= \frac{1}{2m} \sum_{i,n,k} \varepsilon_{jnk} \{r_n p_k, p_i^2\} + \sum_{n,k} \varepsilon_{jnk} \{r_n p_k, V(|\mathbf{r}|)\} \\
&= \frac{1}{2m} \sum_{i,n,k} \varepsilon_{jnk} p_k \{r_n, p_i^2\} + \sum_{n,k} \varepsilon_{jnk} r_n \{p_k, V(|\mathbf{r}|)\} \\
&= \frac{1}{m} \sum_{i,n,k} \varepsilon_{jnk} p_k p_i \delta_{n,i} - \sum_{n,k} \varepsilon_{jnk} r_n \frac{\partial V(|\mathbf{r}|)}{\partial r_k} \\
&= \underbrace{\frac{1}{m} \sum_{n,k} \varepsilon_{jnk} p_k p_n}_{=0} - \frac{1}{|\mathbf{r}|} \frac{\partial V(|\mathbf{r}|)}{\partial |\mathbf{r}|} \underbrace{\sum_{n,k} \varepsilon_{jnk} r_n r_k}_{=0} \\
&= 0
\end{aligned}$$

Damit ist  $l_j = \text{const.}$ , d.h. der relative Drehimpuls  $\mathbf{l}$  ist eine Erhaltungsgröße.

Da der Drehimpuls  $\mathbf{l}$  nach Betrag und Richtung im Lauf der zeitlichen Evolution konstant bleibt, findet die Relativbewegung  $\mathbf{r}(t)$  der beiden Massen in der Ebene  $\langle \mathbf{r}(t), \mathbf{l} \rangle = 0$  statt, denn

$$\langle \mathbf{r}(t), \mathbf{l} \rangle = \langle \mathbf{r}(t), \mathbf{r}(t) \wedge \mathbf{p}(t) \rangle = \left\langle \mathbf{p}(t), \underbrace{\mathbf{r}(t) \wedge \mathbf{r}(t)}_{\equiv 0} \right\rangle = 0. \text{ Entsprechend ist auch } \langle \mathbf{p}(t), \mathbf{l} \rangle = 0, \text{ d.h.}$$

Impuls  $\mathbf{p}(t)$  und Position  $\mathbf{r}(t)$  sind koplanar. Dann gibt es nur zwei unabhängige Freiheitsgrade um die Bewegung zu beschreiben. Bei der ebenen Bewegung im Zentralkraftpotential  $V(|\mathbf{r}|)$  steht der Drehimpulsvektor  $\mathbf{l}$  senkrecht auf der Bahnebene. Die Kinetische Energie der Schwerpunktsbewegung und die Gesamtenergie der Relativbewegung sind ebenfalls Erhaltungsgrößen:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle}{2M} &= \left\{ \frac{\langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle}{2M}, \widetilde{\mathcal{H}} \right\} = 0 \\ \frac{d}{dt} \left( \frac{\langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle}{2m} + V(|\mathbf{r}|) \right) &= \left\{ \frac{\langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle}{2m} + V(|\mathbf{r}|), \widetilde{\mathcal{H}} \right\} = 0 \end{aligned}$$

Also gilt:

$$\begin{aligned} \frac{\langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle}{2M} &= \text{const.} = E_S \\ \frac{\langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle}{2m} + V(|\mathbf{r}|) &= \text{const.} = E_r \end{aligned}$$

Die kartesischen Komponenten der Relativkoordinaten  $r_j$  und der zu  $r_j$  konjugierten Impulse  $p_j$  genügen den Hamilton'schen Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \dot{r}_j &= \left\{ r_j, \widetilde{\mathcal{H}} \right\} \\ &= \left\{ r_j, \frac{\langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle}{2M} + \frac{\langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle}{2m} + V(|\mathbf{r}|) \right\} \\ &= \left\{ r_j, \frac{\langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle}{2m} \right\} \\ &= \frac{p_j}{m} \\ \\ \dot{p}_j &= \left\{ p_j, \widetilde{\mathcal{H}} \right\} \\ &= \left\{ p_j, \frac{\langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle}{2M} + \frac{\langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle}{2m} + V(|\mathbf{r}|) \right\} \\ &= \left\{ p_j, V(|\mathbf{r}|) \right\} \\ &= -\frac{r_j}{|\mathbf{r}|} \frac{\partial V(|\mathbf{r}|)}{\partial |\mathbf{r}|} \end{aligned}$$

Wir nehmen jetzt ohne Beschränkung der Allgemeinheit an, dass die Bewegung in der Ebene  $r_3 = 0$  erfolgt. Wir definieren in dieser Ebene zwei orthogonale Einheitsvektoren

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_r(t) &= \cos \phi(t) \mathbf{e}_1 + \sin \phi(t) \mathbf{e}_2 \\ \mathbf{e}_\phi(t) &= -\sin \phi(t) \mathbf{e}_1 + \cos \phi(t) \mathbf{e}_2 \end{aligned}$$

Dann gilt

$$\mathbf{r}(t) = r(t)\mathbf{e}_r(t)$$

Es folgt durch Ableiten nach der Zeit  $t$  :

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{e}}_r(t) &= \dot{\phi}(t)\mathbf{e}_\phi(t) \\ \dot{\mathbf{e}}_\phi(t) &= -\dot{\phi}(t)\mathbf{e}_r(t)\end{aligned}\tag{5.30}$$

Somit folgt

$$\dot{\mathbf{r}}(t) = \dot{r}(t)\mathbf{e}_r(t) + r(t)\dot{\phi}(t)\mathbf{e}_\phi(t)$$

Aufgrund der Hamilton'schen Bewegungsgleichung ist natürlich

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}}(t) &= \frac{\mathbf{p}(t)}{m} \\ \dot{\mathbf{p}}(t) &= -\frac{\partial V(|\mathbf{r}|)}{\partial |\mathbf{r}|} \cdot \mathbf{e}_r(t)\end{aligned}$$

Damit erhalten wir für den Drehimpuls

$$\begin{aligned}\mathbf{l} &= \mathbf{r}(t) \wedge \mathbf{p}(t) = \mathbf{r}(t) \wedge m\dot{\mathbf{r}}(t) \\ &= r(t)\mathbf{e}_r(t) \wedge m \left[ \dot{r}(t)\mathbf{e}_r(t) + r(t)\dot{\phi}(t)\mathbf{e}_\phi(t) \right] \\ &= m[r(t)]^2 \dot{\phi}(t)\mathbf{e}_r(t) \wedge \mathbf{e}_\phi(t) \\ &= l_3\mathbf{e}_3\end{aligned}$$

Wegen  $l_3 = \text{const.}$  ergibt sich sofort

$$\dot{\phi}(t) = \frac{l_3}{m|\mathbf{r}(t)|^2}\tag{5.31}$$

### 5.6.1 Beispiel: Kepler Problem

Die potentielle Energie  $V(|\mathbf{r}|)$  zweier Massen im Abstand  $|\mathbf{r}|$  ist durch das Newton'sche Gravitationsgesetz gegeben:

$$\begin{aligned}V(|\mathbf{r}|) &= -\gamma\frac{M}{|\mathbf{r}|} \\ \frac{\partial V(|\mathbf{r}|)}{\partial |\mathbf{r}|} &= \gamma\frac{M}{|\mathbf{r}|^2}\end{aligned}$$

Damit liefert die Hamilton'sche Bewegungsgleichung:

$$\dot{\mathbf{p}}(t) = -\mathbf{e}_r(t)\gamma\frac{M}{|\mathbf{r}(t)|^2}$$

Aufgrund der Beziehung (5.31) können wir für den Fall  $l_3 \neq 0$  den Abstand  $|\mathbf{r}(t)|$  eliminieren:

$$\dot{\mathbf{p}}(t) = -\dot{\phi}(t)\mathbf{e}_r(t)\frac{m}{l_3}\gamma M$$

Mit Gleichung (5.30) ergibt sich hieraus mit einer Integrationskonstanten  $\mathbf{p}_A$  der Impuls zu

$$\mathbf{p}(t) = \mathbf{p}_A + \mathbf{e}_\phi(t)\frac{m}{l_3}\gamma M$$

Wir bilden jetzt das Skalarprodukt

$$\begin{aligned}
 l_3 &= \langle \mathbf{l}, \mathbf{e}_3 \rangle = \langle \mathbf{r}(t) \wedge \mathbf{p}(t), \mathbf{e}_3 \rangle \\
 &= \left\langle r(t) \mathbf{e}_r(t) \wedge \left[ \mathbf{p}_A + \mathbf{e}_\phi(t) \frac{m}{l_3} \gamma M \right], \mathbf{e}_3 \right\rangle \\
 &= r(t) \left[ \langle \mathbf{e}_r(t) \wedge \mathbf{p}_A, \mathbf{e}_3 \rangle + \frac{m}{l_3} \gamma M \langle \mathbf{e}_3, \mathbf{e}_3 \rangle \right] \\
 &= r(t) \left[ \langle \mathbf{p}_A \wedge \mathbf{e}_3, \mathbf{e}_r(t) \rangle + \frac{m}{l_3} \gamma M \right],
 \end{aligned}$$

und erhalten ohne weitere Rechnung (!) als Kepler-Bahn  $\mathbf{r}(t) = r(t) \mathbf{e}_r(t)$  die Gleichung eines Kegelschnitts, wobei der Ursprung  $(0, 0)$  des Koordinatensystems ein Brennpunkt ist:

$$\begin{aligned}
 r(t) &= \tilde{r}[\phi(t)] = \frac{l_3}{\langle \mathbf{p}_A \wedge \mathbf{e}_3, \mathbf{e}_r(t) \rangle + \frac{m}{l_3} \gamma M} \\
 &= \frac{l_3}{(\mathbf{p}_A \wedge \mathbf{e}_3)_1 \cos \phi(t) + (\mathbf{p}_A \wedge \mathbf{e}_3)_2 \sin \phi(t) + \frac{m}{l_3} \gamma M}
 \end{aligned}$$

Wir können durch eine Drehung des Koordinatensystems immer erreichen, daß  $(\mathbf{p}_A \wedge \mathbf{e}_3)_2 = 0$ . Mit den Definitionen für die Bahnparameter

$$\begin{aligned}
 \varepsilon &= -\frac{(\mathbf{p}_A \wedge \mathbf{e}_3)_1}{\frac{m}{l_3} \gamma M} = -\frac{l_3}{m \gamma M} (\mathbf{p}_A \wedge \mathbf{e}_3)_1 \\
 \mathcal{P} &= \frac{l_3^2}{m \gamma M}
 \end{aligned}$$

folgt:

$$\tilde{r}(\phi) = \frac{\mathcal{P}}{1 - \varepsilon \cos \phi}$$

Es ist nicht weiter schwierig zu zeigen, dass die Kepler'schen Bahnen für  $\varepsilon < 1$  Ellipsen sind, wobei sich die Schwerpunktsmasse im Zentrum der Ellipse befindet (Johannes Kepler, 1571-1630). Für  $\varepsilon = 0$  ist die Bahn ein Kreis, für  $\varepsilon = 1$  eine Parabel, und für  $\varepsilon > 1$  eine Hyperbel.

### 5.6.2 Eichtransformation

Lagrangefunktionen  $\mathcal{L}$  und  $\tilde{\mathcal{L}}$ , die sich um eine totale Zeitableitung einer Funktion  $\Lambda(q, t)$  unterscheiden,

$$\frac{d}{dt} \Lambda(q, t) = \sum_k \frac{\partial \Lambda}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial \Lambda}{\partial t}$$

führen, wie wir bereits gezeigt haben, auf identische Bewegungsgleichungen.

Sei

$$\tilde{\mathcal{L}}(q, \dot{q}, t) = \mathcal{L}(q, \dot{q}, t) - \frac{d}{dt} \Lambda(q, t)$$

Dann sind die verallgemeinerten Impulse  $p_k = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k}$  und  $P_k = \frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}}{\partial \dot{q}_k}$  manifest verschieden:

$$P_k = p_k - \frac{\partial \Lambda}{\partial q_k}$$

Diese Beziehung kann als Spezialfall einer  $\mathcal{F}_2$ -Transformation aufgefasst werden:

$$\mathcal{F}_2(q, P, t) = \sum_k q_k P_k + \Lambda(q, t)$$

Die zugeordneten Koordinaten sind

$$\begin{aligned} Q_k &= \frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial P_k} = q_k \\ p_k &= \frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial q_k} = P_k + \frac{\partial \Lambda(q, t)}{\partial q_k} \end{aligned}$$

Somit lautet die neue Hamiltonfunktion

$$\widetilde{\mathcal{H}}(Q, P, t) = \mathcal{H}(q, p, t) + \frac{\partial \mathcal{F}_2(q, P, t)}{\partial t},$$

wobei auf der rechten Seite die alten Koordinaten  $q_k$  und alten Impulse  $p_k$  als Funktionen der neuen Koordinaten  $Q_k$  und neuen Impulse  $P_k$  auszudrücken sind. Es folgt durch Einsetzen:

$$\widetilde{\mathcal{H}}(Q, P, t) = \mathcal{H} \left[ Q, \left( P + \frac{\partial \Lambda(Q, t)}{\partial Q} \right), t \right] + \frac{\partial \Lambda(Q, t)}{\partial t}$$

Für die Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H}(x, p, t) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

bedeutet das:

$$\widetilde{\mathcal{H}}(X, P, t) = \frac{1}{2m} \left( P + \frac{\partial \Lambda(X, t)}{\partial X} \right)^2 + V(X) + \frac{\partial \Lambda(X, t)}{\partial t}$$

Damit steht eine Methode zur Verfügung, linear an den Impuls  $P$  koppelnde Terme in einer Hamiltonfunktion mittels einer kanonischen Transformation zu eliminieren!

### 5.6.3 Differentialgleichung von Hamilton-Jacobi

Die Idee besteht darin, eine Kanonische Transformation zu finden, so dass die neue Hamiltonfunktion identisch Null ist:

$$\widetilde{\mathcal{H}}(Q, P, t) \stackrel{!}{=} 0$$

Denn aufgrund der Hamilton'schen Bewegungsgleichungen folgt dann, dass die neuen Koordinaten  $Q_k$  und die neuen Impulse  $P_k$  konstante Größen sind.

Wir betrachten eine  $\mathcal{F}_2$ -Transformation als Erzeugende der gewünschten kanonischen Transformation:

$$\begin{aligned} Q_k &= \frac{\partial \mathcal{F}_2(q, P, t)}{\partial P_k} \\ p_k &= \frac{\partial \mathcal{F}_2(q, P, t)}{\partial q_k} \end{aligned}$$

Dann folgt sofort wegen

$$\widetilde{\mathcal{H}}(Q, P, t) = \mathcal{H}(q, p, t) + \frac{\partial \mathcal{F}_2(q, P, t)}{\partial t},$$

indem wir die alten Impulse  $p_k$  durch die Ableitungen  $\frac{\partial \mathcal{F}_2(q, P, t)}{\partial q_k}$  ersetzen, die Differentialgleichung von Hamilton-Jacobi:

$$0 = \mathcal{H} \left( q, \frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial q_k}, t \right) + \frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial t}$$

In der Regel lässt sie sich nur für Spezialfälle explizit lösen.

Eine Variante des Verfahrens besteht darin, eine weniger drastische Forderung an die neue Hamiltonfunktion zu stellen:

$$\widetilde{\mathcal{H}}(Q, P, t) \stackrel{!}{=} E(P)$$

Dann gilt für die neue  $\mathcal{F}_2$ -Transformation die modifizierte Hamilton-Jacobi Gleichung:

$$\mathcal{H}\left(q, \frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial q_k}, t\right) + \frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial t} = E(P)$$

In dem Fall ist

$$\begin{aligned} \dot{Q}_k &= \frac{\partial E(P)}{\partial P_k} \\ \dot{P}_k &= -\frac{\partial E(P)}{\partial Q_k} = 0, \end{aligned}$$

also

$$P_k = \text{const}$$

und wegen

$$v_k = \frac{\partial E(P)}{\partial P_k} = \text{const}$$

folgt das Resultat

$$Q_k(t) = Q_{k,0} + v_k t$$

Die neuen Impulse  $P_k$  sind Konstante und die neuen Koordinaten sind lineare Funktionen der Zeit.

## 5.7 Invarianz des Phasenraumvolumens unter kanonischen Transformationen

Betrachten wir ein kleines Volumenelement  $d\Omega(\mathbf{x})$  an der Stelle  $\mathbf{x}$  im Phasenraum. Wie ändert sich der Volumeninhalt  $|d\Omega(\mathbf{x})| = d^{2M}x = d^M q d^M p$  unter einer kanonischen Transformation  $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{X}$ ?

Mit

$$\begin{pmatrix} dQ \\ dP \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W & F \\ G & K \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dq \\ dp \end{pmatrix}$$

folgt nach der Substitutionsregel für Bereichsintegrale<sup>6</sup>

$$|d\Omega(\mathbf{X})| = d^M Q d^M P = \det \begin{pmatrix} W & F \\ G & K \end{pmatrix} d^M q d^M p = |d\Omega(\mathbf{x})|$$

Invarianz des Maßes bedeutet, dass der Betrag der Determinante in gleich 1 sein muss. Dazu betrachten wir die Identität für Blockmatrizen:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{1} & -FK^{-1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} W & F \\ G & K \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W - FK^{-1}G & \mathbf{0} \\ G & K \end{pmatrix}$$

<sup>6</sup>Die Substitutionsregel für Bereichsintegrale, bzw. der Transformationssatz lautet: Sei  $\Omega$  ein Gebiet,  $\phi: \Omega \rightarrow \Omega' = \phi(\Omega)$  eine Koordinatentransformation ( $C^1$ -Diffeomorphismus), dann gilt

$$\int_{\Omega'} f(\mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = \int_{\Omega} f(\phi(\mathbf{y})) |\det(D\phi(\mathbf{y}))| d^n \mathbf{y}$$

wobei  $D\phi(\mathbf{y})$  die Jacobimatrix ist.

Also folgt

$$\det \left[ \begin{pmatrix} \mathbf{1} & -FK^{-1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} W & F \\ G & K \end{pmatrix} \right] = \det \begin{pmatrix} W - FK^{-1}G & \mathbf{0} \\ G & K \end{pmatrix},$$

und weiter nach dem Determinantenmultiplikationssatz:

$$\underbrace{\det \begin{pmatrix} \mathbf{1} & -FK^{-1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix}}_{=1} \cdot \det \begin{pmatrix} W & F \\ G & K \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} W - FK^{-1}G & \mathbf{0} \\ G & K \end{pmatrix}$$

Schließlich

$$\det \begin{pmatrix} W & F \\ G & K \end{pmatrix} = \det(W - FK^{-1}G) \cdot \det(K) = \det(WK^T - FK^{-1}GK^T)$$

Aus den fundamentalen Poissonklammern  $\{P_j, P_k\} = 0 = \{Q_j, Q_k\}$  und  $\{Q_j, P_k\} = \delta_{kj}$  folgt aber:

$$WK^T - FK^{-1}GK^T = FG^T + \mathbf{1} - FG^T(K^T)^{-1}K^T = \mathbf{1}$$

Damit ist gezeigt:

$$\det \begin{pmatrix} W & F \\ G & K \end{pmatrix} = 1$$

Also folgt, dass der Inhalt des Phasenraumvolumen invariant unter der kanonischen Transformation ist:

$$|d\Omega(\mathbf{X})| = d^M Q d^M P = d^M q d^M p = |d\Omega(\mathbf{x})|$$

Die Gestalt des Gebietes  $d\Omega(\mathbf{X})$  kann erheblich von der Gestalt des Gebietes  $d\Omega(\mathbf{x})$  abweichen, aber beide Volumina haben den gleichen Inhalt!

## 5.8 Liouville-Gleichung

Um einen Zustand  $\mathbf{x} = (q, p)$  (als Punkt im  $2M$ -dim Phasenraum) eines Vielteilchensystems zur Zeit  $t$  zu kennen, muss man einen Anfangszustand  $\mathbf{x}_0$  zur Zeit  $t = 0$  vorgeben, und anschließend die kanonischen Bewegungsgleichungen lösen. Für makroskopische Vielteilchensysteme mit einer Anzahl von  $M \sim 10^{23}$  Freiheitsgraden ist das vorgeschlagene Verfahren in der Praxis unmöglich. Daher rührt der Gedanke einer *statistischen* Beschreibung des Systems, bei der man nach der Wahrscheinlichkeit  $w(t, \mathbf{x}; \Omega)$  fragt, mit der sich ein Zustand  $\mathbf{x}$  in einem Volumenelement  $\Omega$  des Phasenraums zur Zeit  $t$  befindet:

$$w(t, \mathbf{x}; \Omega) = \int_{\Omega} d^{2M} x \rho(t, \mathbf{x}) \quad (5.32)$$

Die Funktion  $\rho(t, \mathbf{x})$  auf dem Phasenraum ist die Wahrscheinlichkeitsdichte. Selbstverständlich ist

$$\int d^{2M} x \rho(t, \mathbf{x}) = 1$$

Diese Gleichung besagt ja nur, dass die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das System sich in *irgendeinem* Zustand des Phasenraums befindet, für alle Zeiten  $t$  gleich Eins ist.

Kennt man  $\rho(t, \mathbf{x})$ , so kann man Erwartungswerte von Observablen  $A(t, \mathbf{x})$  als Mittelwert berechnen:

$$A(t) = \langle A(t, \mathbf{x}) \rangle = \int d^{2M} x \rho(t, \mathbf{x}) A(t, \mathbf{x}) \quad (5.33)$$



Wenn das Schwankungsquadrat

$$\langle [A(t, \mathbf{x})]^2 \rangle - [\langle A(t, \mathbf{x}) \rangle]^2 \quad (5.34)$$

genügend klein ist darf man in guter Näherung den makroskopischen Messwert mit dem Mittelwert identifizieren.

In der statistischen Mechanik betrachtet man nicht einzelne Zustände, sondern ein Ensemble von Zuständen. Jedes Mitglied des Ensemble wird durch einen Punkt im Phasenraum repräsentiert. Die Gesamtheit dieser Punkte bildet zur Zeit  $t = 0$  eine 'Wolke' von Punkten im Phasenraum, deren Verteilung durch die Verteilungsfunktion  $\rho(t = 0, \mathbf{x})$  beschrieben wird. Im Verlauf der zeitlichen Evolution bewegen sich die Punkte in dieser Wolke gemäß den Hamilton'schen Bewegungsgleichungen. So verändert sich die Gestalt und Dichte dieser Wolke, was durch die zeitabhängige Verteilungsfunktion  $\rho(t, \mathbf{x})$  beschrieben wird.

Wie wir bereits allgemein bewiesen haben, besitzt ein infinitesimales Volumenelement  $d\Omega$  im Phasenraum die Eigenschaft, dass sein Volumeninhalt  $|d\Omega| = d^{2M}x = d^M q d^M p$  invariant unter kanonischen Transformationen ist. Eine Zeittranslation  $t \mapsto t + \tau$

$$[q(t), p(t)] \mapsto [\tilde{q}(t), \tilde{p}(t)] = [q(t + \tau), p(t + \tau)]$$

ist insbesondere eine Kanonische Transformation. Denn wie bereits gezeigt, sind die fundamentalen Poissonklammern invariant unter zeitlichen Translationen. Somit ändert sich zwar die Gestalt des Gebietes  $d\Omega$  im Lauf der zeitlichen Evolution, aber der Inhalt des Volumenelements ist eine Invariante:

$$\begin{aligned} |d\Omega(t)| &= d^M q d^M p = d^M \tilde{q} d^M \tilde{p} = |d\Omega(t + \tau)| \\ \frac{d}{dt} |d\Omega(t)| &= 0 \end{aligned}$$

Damit ist auch die Anzahl  $dN$  von Teilchen im Volumen  $d\Omega$  zeitlich konstant:

$$dN(t) = \rho(t; \mathbf{x}) |d\Omega|$$

Folglich gilt

$$0 = \frac{d}{dt} N(t) = \left( \frac{d}{dt} \rho(t; \mathbf{x}) \right) |d\Omega|$$

Somit besitzt die Verteilungsfunktion  $\rho(t; \mathbf{x})$  die Bewegungsgleichung (im erweiterten Phasenraum):

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} \rho(t; \mathbf{x}) = \{\rho(t; \mathbf{x}), \mathcal{H}\} \\ &= \{\rho(t; \mathbf{x}), \mathcal{H} - E\} \\ &= \{\rho(t; \mathbf{x}), \mathcal{H}\} + \frac{\partial}{\partial t} \rho(t; \mathbf{x}) \\ &= \sum_a \frac{\partial}{\partial x_a} [\dot{x}_a \rho(t; \mathbf{x})] + \frac{\partial}{\partial t} \rho(t; \mathbf{x}) \end{aligned}$$

Die Analogie zur Kontinuitätsgleichung bei einer inkompressiblen Flüssigkeit ist offensichtlich. Der durch  $\rho(t; \mathbf{x})$  beschriebenen Wahrscheinlichkeitsdichte im Phasenraum beschreibt anschaulich die Massendichte einer inkompressiblen Flüssigkeit, die Poissonklammer  $\{\rho(t; \mathbf{x}), \mathcal{H}\}$  kann

als Divergenz der Stromdichte  $\dot{\mathbf{x}}\rho(t; \mathbf{x})$  gedeutet werden. Die Umformung in der letzten Zeile basiert auf der Identität

$$\begin{aligned} \sum_a \frac{\partial}{\partial x_a} [\dot{x}_a \rho(t; \mathbf{x})] &= \sum_{a,b} \frac{\partial}{\partial x_a} \left[ \varepsilon_{ab} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_b} \rho(t; \mathbf{x}) \right] \\ &= \left[ \underbrace{\sum_{a,b} \varepsilon_{ab} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial x_a \partial x_b} \rho(t; \mathbf{x})}_{\equiv 0} + \sum_{a,b} \varepsilon_{ab} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_b} \frac{\partial \rho(t; \mathbf{x})}{\partial x_a} \right] \\ &= \{ \rho(t; \mathbf{x}), \mathcal{H} \} \end{aligned}$$

Es folgt die sog. Liouville Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(t; \mathbf{x}) &= -\{ \rho(t; \mathbf{x}), \mathcal{H} \} \\ &= -\mathcal{L} \rho(t; \mathbf{x}), \end{aligned}$$

mit der (formalen) Lösung:

$$\rho(t; \mathbf{x}) = \exp[-t\mathcal{L}] \rho(t=0; \mathbf{x})$$

Aufgrund der erwähnten Inkompressibilitätseigenschaft ist Lokalisierung, d.h. eine Verschmälerung der Varianz der Ortsverteilung der Teilchen eines Systems, nur um den Preis einer entsprechenden Verbreiterung der Impulsverteilung zu haben. Das erinnert an die Heisenbergsche Unschärferelation in der Quantenmechanik. Allerdings bezieht sich die Aussage des Liouvilleschen Satzes auf die *statistische* Verteilungsfunktion eines Systems vieler Teilchen im Phasenraum (Zustände eines Ensembles), während die Unschärferelation der Quantenmechanik von den Eigenschaften eines *einzelnen* Teilchens handelt! Das ist der fundamentale Unterschied. Die Liouville-Gleichung gilt für Systeme, deren Dynamik durch eine Hamiltonfunktion  $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$  beschrieben wird. Sind Reibungskräfte (Dissipation) im Spiel, so dass eine Hamilton'sche Dynamik nicht gegeben ist, so verliert die Liouville-Gleichung ihre Gültigkeit.

### 5.8.1 Hamiltonfunktion für gedämpften Harmonischen Oszillator

Wir betrachten einen Massepunkt  $m$ , der an einer Feder mit Federkonstante  $D$  aufgehängt ist, und (während er sich bewegt) eine Reibungskraft proportional zur Geschwindigkeit erfährt. Dieses System kann tatsächlich durch die folgende Lagrangefunktion beschrieben werden:

$$\mathcal{L}(x, \dot{x}, t) = \left( \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{1}{2} D x^2 \right) e^{\frac{t}{\tau}}$$

Dann lautet die Lagrange'sche Bewegungsgleichung:

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} \\ &= \frac{d}{dt} \left( m \dot{x} e^{\frac{t}{\tau}} \right) + D x e^{\frac{t}{\tau}} \\ &= e^{\frac{t}{\tau}} \left( m \ddot{x} + \frac{m}{\tau} \dot{x} + D x \right) \end{aligned}$$

Da  $e^{-\frac{t}{\tau}} \neq 0$  ergibt sich unmittelbar die Bewegungsgleichung eines gedämpften harmonischen Oszillators:

$$m\ddot{x} + \frac{m}{\tau}\dot{x} + Dx = 0$$

Die Rückstellkraft in  $x$ -Richtung ist  $-Dx$ , die Reibungskraft ist  $-\frac{m}{\tau}\dot{x}$ . Den kanonischen Impuls bestimmen wir zu

$$\begin{aligned} p &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}e^{-\frac{t}{\tau}} \\ \dot{x} &= \frac{p}{m}e^{-\frac{t}{\tau}} \end{aligned}$$

Daraus erhalten wir die Hamiltonfunktion:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(x, p, t) &= p\dot{x} - \mathcal{L} \\ &= \frac{p^2}{m}e^{-\frac{t}{\tau}} - \left( \frac{p^2}{2m}e^{-\frac{2t}{\tau}} - \frac{1}{2}Dx^2 \right) e^{-\frac{t}{\tau}} \\ &= \frac{p^2}{2m}e^{-\frac{t}{\tau}} + \frac{D}{2}x^2e^{-\frac{t}{\tau}} \end{aligned}$$

Da  $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} \neq 0$  ist die Energie keine Erhaltungsgröße. Auch ist hier ersichtlich, daß  $\mathcal{H}$  nicht die Summe von kinetischer und potentieller Energie ist.

Die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen lauten

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} = \frac{p}{m}e^{-\frac{t}{\tau}} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} = -Dxe^{-\frac{t}{\tau}} \end{aligned}$$

Also

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & e^{-\frac{t}{\tau}} \\ -De^{-\frac{t}{\tau}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix}$$

Aufgrund der Hamilton'schen Struktur der Bewegungsgleichungen bleibt das Phasenraumvolumen  $|d\Omega(t)|$  in der  $x-p$  Ebene im Lauf der zeitlichen Evolution des Systems invariant und es gilt der Satz von Liouville. Aber die Phasenraumtrajektorie  $\Gamma(t) = [x(t), p(t)]$  erstreckt sich dabei auf ein *unbeschränktes* Gebiet des Phasenraums, da  $p(t)$  exponentiell anwächst, während  $x(t)$  exponentiell schrumpft.

Wie das Beispiel zeigt, gibt es durchaus Hamiltonsche Systeme mit Dissipation.

## 5.9 Wiederkehrsatz von Poincaré

Wir betrachten ein Hamilton'sches System, dessen Phasenraumtrajektorie  $\Gamma(t)$  sich ausgehend von einem Anfangszustand  $\Gamma_0 = \Gamma(t=0)$  während der zeitlichen Evolution des Systems immer in einem *beschränkten* Gebiet  $G$  des Phasenraumes mit Volumeneinhalt  $|G| < \infty$  befindet. Man denke zum Beispiel an ein Gas von Molekülen mit vorgegebener Gesamtenergie  $E = \text{const.}$ , das sich in einem Behälter mit vorgegebenem Volumen befindet.

Sei  $U_0 \subset G$  eine Wolke von Anfangswerten im Phasenraum, etwa in Gestalt einer Kugelumgebung von  $\Gamma_0$  mit Radius  $\delta$  und Volumeneinhalt  $|U_0| < |G|$ . Bei der zeitlichen Entwicklung des Systems während einer endlichen fixen Zeitspanne  $T$  werden die Punkte von  $U_0$  durch die Hamilton'sche Dynamik auf ein Gebiet  $U_T \subset G$  abgebildet. Nach der Zeitspanne  $2T$  entsteht dann

das Bild  $U_{2T}$  von  $U_0$ , usw. Auf diese Weise erzeugen wir eine Folge von Gebieten  $\{U_{nT}\}_{n \in \mathbb{N}}$  im Phasenraum.

Angenommen die Gebiete  $U_{nT} \subset G$  sind alle disjunkt. Dann besagt der Satz von Liouville, daß der Volumeninhalt  $|U_{nT}|$  aller dieser Gebiete  $U_{nT}$  gleich  $|U_0|$  sein muss. Wenn aber alle Gebiete  $U_{nT}$  disjunkt sind, so wird beim Übergang von  $U_{nT}$  zu  $U_{(n+1)T}$  für  $n = 0, 1, 2, \dots$  jedesmal ein neues Teilgebiet  $U_{(n+1)T}$  mit Volumen  $|U_{(n+1)T}| = |U_0|$  des insgesamt zur Verfügung stehenden Gebietes  $G$  mit Volumen  $|G|$  aufgebraucht. Dann existiert eine Zahl  $L$ , so dass  $L \cdot |U_0| > |G|$ . Das ist ein Widerspruch zur Voraussetzung, dass die Dynamik des Systems im Lauf der zeitlichen Evolution auf das Gebiet  $G$  des Phasenraums mit endlichem Volumen  $|G|$  eingeschränkt bleibt.

Also können nicht alle Glieder der Folge  $\{U_{nT}\}_{n \in \mathbb{N}}$  disjunkt sein! Angenommen es ist  $U_{jT} \cap U_{kT} \neq \emptyset$  mit  $j < k$ . Dann muss auch gelten  $U_{(j-1)T} \cap U_{(k-1)T} \neq \emptyset$ , denn die von einem Punkt  $\tilde{\Gamma}_0 \in U_0$  ausgehende Trajektorie  $\tilde{\Gamma}(t)$  ist eindeutig. Fortsetzen dieser Argumentation liefert  $U_{(j-2)T} \cap U_{(k-2)T} \neq \emptyset$  und schließlich  $U_0 \cap U_{(k-j)T} \neq \emptyset$ .

Dies gilt für jedes noch so kleine endliche  $\delta > 0$ . Mit anderen Worten es existieren Punkte  $\tilde{\Gamma}_0$  in der unmittelbaren Umgebung von  $\Gamma_0 \in U_0$ , die nach einer endlichen Wiederkehrzeit  $\hat{T} = (k-j)T$  in die unmittelbare Umgebung des ursprünglichen Startwertes  $\Gamma_0$  zurückkehren!

### Bemerkung

In der Thermodynamik betrachtet man folgende Situation. Ein Gas mit  $N = 10^{23}$  Molekülen befindet sich in einem Volumen  $V_1$ . Das Volumen  $V_1$  ist über eine nicht permeable Zwischenwand von einem benachbarten Volumen  $V_2$  abgetrennt, das völlig leer ist (Vakuum). Zur Zeit  $t = 0$  wird die Zwischenwand beseitigt, so daß die Gasmoleküle nun das gesamte Volumen  $V = V_1 + V_2$  einnehmen. Nach dem Wiederkehrsatz von Poincaré besteht interessanter Weise Gewissheit darüber, dass alle Moleküle sich nach einer Wartezeit  $\hat{T}$  wieder im Volumen  $V_1$  aufhalten werden, so dass das Volumen  $V_2$  völlig leer sein wird. Die Wartezeit, das betreffende Ordnungsphänomen zu beobachten, ist für  $N = 2$  Teilchen kurz, aber für  $N = 10^{23}$  Teilchen sehr, sehr lang (erheblich länger als das Alter des Universums)!

## 5.10 Langzeitprognosen in der Himmelsmechanik

Nach den obigen Betrachtungen stehen die mathematischen Werkzeuge bereit, mit denen man z.B. Probleme der Himmelsmechanik numerisch effizient lösen kann. Dazu betrachten wir Sonne und Jupiter als ein exakt lösbares Zweikörperproblem (Kepler-Problem). Merkur, Venus, Erde und Mars stellen aufgrund ihrer viel kleineren Masse eine „kleine“ Störung dar. Das Problem besteht darin, auf der Suche nach der Antwort auf die Frage von Laplace, ob das Sonnensystem stabil ist, die Langzeitdynamik des Sonnensystems zu charakterisieren. Um von der (als bekannt angenommenen) Anfangskonfiguration  $\mathbf{x}(0)$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  in die ferne Zukunft zur Zeit  $t$  zu integrieren, ist es zweckmäßig zu schreiben:

$$\mathbf{x}(t) = e^{t \cdot \mathcal{L}} \mathbf{x}(0) = \underbrace{(e^{\frac{t}{N} \mathcal{L}} \circ e^{\frac{t}{N} \mathcal{L}} \circ \dots \circ e^{\frac{t}{N} \mathcal{L}})}_{N\text{-mal}} \mathbf{x}(0).$$

Man trennt also die Exponentialfunktion in  $N$  kleine Teile auf, die dann nach und nach berechnet werden können. Diese Auftrennung in Faktoren ist noch exakt. Oft besteht  $\mathcal{H} = \mathcal{H}(q, p) = \mathcal{H}(x)$  aus einem exakt lösbaren Anteil  $\mathcal{H}_0(x)$  und einem „kleinen“ Störterm  $\varepsilon \mathcal{H}_1(x)$ , sodass gilt

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \varepsilon \mathcal{H}_1$$

Dies impliziert eine entsprechende Zerlegung des Liouville Operators

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{L}} &= \hat{\mathcal{L}}_0 + \varepsilon \hat{\mathcal{L}}_1 \\ \hat{\mathcal{L}} x &= \{x, \mathcal{H}\} = \{x, \mathcal{H}_0 + \varepsilon \mathcal{H}_1\} = \{x, \mathcal{H}_0\} + \varepsilon \{x, \mathcal{H}_1\} \\ \hat{\mathcal{L}}_0 x &= \{x, \mathcal{H}_0\} \\ \hat{\mathcal{L}}_1 x &= \{x, \mathcal{H}_1\}\end{aligned}$$

Es ist hervorzuheben, dass im Allgemeinen bei Operatoren auf die Reihenfolge zu achten ist:

$$\hat{\mathcal{L}}_0 \circ \hat{\mathcal{L}}_1 - \hat{\mathcal{L}}_1 \circ \hat{\mathcal{L}}_0 \neq \hat{0}.$$

Daher entsteht bei der folgenden Approximation für den Zeitentwicklungsoperator ein kleiner Fehler:

$$e^{\frac{t}{N} \hat{\mathcal{L}}} = e^{\frac{t}{N} (\hat{\mathcal{L}}_0 + \varepsilon \hat{\mathcal{L}}_1)} = e^{\frac{t}{N} \hat{\mathcal{L}}_1} \circ e^{\frac{t}{N} \varepsilon \hat{\mathcal{L}}_0} + o\left(\frac{t}{N}\right)^2$$

Entsprechende Approximationen sind in der Quantenmechanik als 'Trottersche Produktformel' bekannt. Man kann zeigen, dass der Fehler (mindestens) quadratisch in  $\frac{t}{N}$  ist. Er wird mit zunehmender Zeit  $\frac{t}{N}$  immer größer.<sup>7</sup>

Man erhält so als Approximation für den gesuchten Zustand  $\mathbf{x}(t)$  des Systems in der Zukunft:

$$\tilde{\mathbf{x}}(t) = \left( e^{\frac{t}{N} \hat{\mathcal{L}}_1} \circ e^{\frac{t}{N} \hat{\mathcal{L}}_0} \right)^N \mathbf{x}(0)$$

Insbesondere interessiert der Zustand der kleineren Planeten im Sonnensystem. Sind deren Umlaufbahnen stabil? Bleiben die Rotationszustände der Planeten stabil, oder kommt es aufgrund der (zwar sehr kleinen aber von Null verschiedenen) Spin-Bahn Wechselwirkung der Planeten untereinander zu großen Abweichungen der Orientierung der Rotationsachsen einzelner kleiner Planeten zur Zeit  $t$  im Vergleich zur entsprechenden Orientierung der Rotationsachsen zur Startzeit  $t = 0$  (?), denn nur der Gesamtdrehimpuls des Sonnensystems ist in Strenge erhalten. Für die Erde (und das höher entwickelte Leben auf der Erde) wäre bereits eine relativ kleine Änderung der Orientierung der Rotationsachse des Planeten Erde um einige Winkelgrad eine echte Katastrophe!

Den Effekt des Operators  $e^{\frac{t}{N} \hat{\mathcal{L}}_0}$  auf den Zustand  $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}(0)$  können wir exakt berechnen, da die Lösung des Keplerproblems analytisch bekannt ist :  $\mathbf{y}_0 = e^{\frac{t}{N} \hat{\mathcal{L}}_0} \mathbf{x}_0$ . Aber wie berechnen wir den Effekt des Operators  $e^{\frac{t}{N} \hat{\mathcal{L}}_1}$  auf den analytisch exakt berechneten Zustand  $\mathbf{y}_0$ ? Eine simple Taylorreihenapproximation für die Exponentialfunktion

$$e^{\frac{t}{N} \hat{\mathcal{L}}_1} \simeq 1 - \frac{t}{N} \hat{\mathcal{L}}_1 \tag{5.35}$$

zerstört die Symmetrie  $t \rightarrow -t$  (und sogar die Erhaltung der Energie). Die (offensichtlich zu simple) Approximation  $1 - \frac{t}{N} \hat{\mathcal{L}}_1$  für den Zeitentwicklungsoperators  $e^{\frac{t}{N} \hat{\mathcal{L}}_1}$  ist also keine Kanonische Transformation im Phasenraum des Systems bzgl. der diskreten zeitlichen Entwicklung von  $t = 0$  nach  $\frac{t}{N}$  (und dann nach  $\frac{2t}{N}$  usw.)!

<sup>7</sup>Allgemein gilt für Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  nach Hans Julius Zassenhaus

$$e^{\hat{A} + \hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}]} e^{\frac{1}{6} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]} e^{-\frac{1}{24} [[\hat{A}, \hat{B}], \hat{B}]} \dots$$

viele weitere noch kompliziert aufgebaute Faktoren. So lassen sich im Prinzip noch genauere Approximationen für den Zeitentwicklungsoperator konstruieren.

Viel besser ist eine rationale Approximation:

$$e^{\frac{t}{N}\varepsilon\hat{\mathcal{L}}_1} = \frac{e^{\frac{t}{N}\frac{\varepsilon}{2}\hat{\mathcal{L}}_1}}{e^{-\frac{t}{N}\frac{\varepsilon}{2}\hat{\mathcal{L}}_1}} \approx \frac{\hat{1} + \frac{t}{N}\frac{\varepsilon}{2}\hat{\mathcal{L}}_1}{\hat{1} - \frac{t}{N}\frac{\varepsilon}{2}\hat{\mathcal{L}}_1} \quad (5.36)$$

Die rechte Seite ist in der Tat eine Kanonische Transformation auf dem Phasenraum. In der Praxis berechnet man den neuen Zustand

$$\mathbf{x}_1 = e^{\frac{t}{N}\varepsilon\hat{\mathcal{L}}_1}\mathbf{y}_0 \quad (5.37)$$

durch Lösen eines linearen Gleichungssystems:

$$\left(\hat{1} - \frac{t}{N}\frac{\varepsilon}{2}\hat{\mathcal{L}}_1\right)\mathbf{x}_1 = \left(\hat{1} + \frac{t}{N}\frac{\varepsilon}{2}\hat{\mathcal{L}}_1\right)\mathbf{y}_0$$

Dieses Vorgehen vermeidet die explizite Berechnung der Inversen des Operators  $\left(\hat{1} - \frac{t}{N}\frac{\varepsilon}{2}\hat{\mathcal{L}}_1\right)$ . Nachdem  $\mathbf{x}_1 = e^{\frac{t}{N}\hat{\mathcal{L}}_1} \cdot e^{\frac{t}{N}\varepsilon\hat{\mathcal{L}}_0}\mathbf{x}_0$  berechnet ist, lässt sich das Verfahren iterieren. Man erhält so für  $m = 0, 1, \dots, N - 1$  eine Rekursion zur Berechnung einer Approximation  $\tilde{\mathbf{x}}(t)$  des Zustands  $\mathbf{x}(t)$  in der fernen Zukunft:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_m &= e^{\frac{t}{N}\hat{\mathcal{L}}_0}\mathbf{x}_0 \\ \left(\hat{1} - \frac{t}{N}\frac{\varepsilon}{2}\hat{\mathcal{L}}_1\right)\mathbf{x}_{m+1} &= \left(\hat{1} + \frac{t}{N}\frac{\varepsilon}{2}\hat{\mathcal{L}}_1\right)\mathbf{y}_m \end{aligned} \quad (5.38)$$

Dabei wird  $\mathbf{y}_m$  exakt aus der analytisch bekannten Lösung des Keplerproblems berechnet, während  $\mathbf{x}_{m+1}$  numerisch berechnet wird. Da die Keplerlösung analytisch bekannt ist, braucht man das Zeitintervall  $\frac{t}{N}$  nicht als klein gegenüber der typischen Zeitskala des Keplerproblems anzunehmen. Nur die für den Einfluss der Störungen charakteristische Zeit  $\frac{t}{N}\frac{\varepsilon}{2}$  muss klein sein! Das skizzierte Verfahren lässt sich systematisch verbessern, in dem z.B. eine Trotter Approximation höherer Ordnung für den Zeitentwicklungsoperator verwendet wird.

Literatur zum Weiterlesen: J. Laskar and P. Robutel in "Stability of the planetary three-body problem: expansion of the planetary Hamiltonian", *Celest.Mech.*, 62, 193-217 (1995).

## Kapitel 6

# Prinzip der stationären Wirkung und Noethertheorem

### 6.1 Einleitung

Ein auf dem Begriff des Wirkungsintegrals

$$S[q_1, q_0, E, \alpha] = \int_{q_0}^{q_1} dq \cdot p$$

aufbauendes Variationsprinzip zur Bestimmung der physikalischen Bahn  $q(t)$  eines Massenpunkts, der sich unter dem Einfluss konservativer Kräfte bewegt, hatten wir bereits im Zusammenhang mit der charakteristischen Funktion von Hamilton kennengelernt und erfolgreich zur Lösung des Brachistochronen-Problems verwandt. Wir werden in diesem Kapitel ein viel allgemeineres Variationsprinzip, das Prinzip der stationären Wirkung, kennenlernen. Die Bewegungsgleichungen zur Bestimmung der klassischen Bahn eines Teilchens, die wir bereits im Lagrange- bzw. Hamilton-Formalismus allgemein hergeleitet haben, lassen sich ebenso aus dem Prinzip der stationären Wirkung herleiten. Das Prinzip der stationären Wirkung besitzt als Epitom eine über die klassische Mechanik hinausgehende tiefere Bedeutung in der Quantenmechanik und Feldtheorie.

### 6.2 Prinzip der Stationären Wirkung

Die Definition der Wirkung über die charakteristische Funktion von Hamilton wollen wir jetzt durch eine allgemeinere Begriffsbildung ersetzen. Wir betrachten das sog. Wirkungsfunctional<sup>1</sup>

$$A[(q(\cdot); t_a, t_b)] = \int_{t_a}^{t_b} dt \mathcal{L} \left[ q(t), \frac{d}{dt} q(t), t \right]$$

Der Integrand ist hier die Lagrangefunktion eines mechanischen Systems (vieler wechselwirkender) Teilchen mit einer Anzahl  $M$  von Freiheitsgraden. Es bezeichnet  $q(t) = [q_1(t), \dots, q_M(t)]$  die verallgemeinerten Lagekoordinaten der Teilchen des Systems zur Zeit  $t$ , und  $\dot{q}(t) = \frac{d}{dt} q(t)$

<sup>1</sup>„A“ steht für *englisch* „action“. Die Wirkung ist als Produkt von Energie und Zeit definiert.

bezeichnet die entsprechenden verallgemeinerten Geschwindigkeiten. Es sollen Anfangswerte  $q_a = q(t_a)$  und Endwerte  $q_b = q(t_b)$  eines jeden Teilchens des Systems fest vorgegeben sein<sup>2</sup>.

Wir betrachten jetzt zwei benachbarte Trajektorien  $q(\cdot)$  und  $\tilde{q}_\varepsilon(\cdot)$ :

$$\tilde{q}_\varepsilon(\cdot) = q(\cdot) + \varepsilon\eta(\cdot) \quad (6.1)$$

Mit der Schreibweise  $q(\cdot)$  bringen wir zum Ausdruck, dass wir die Trajektorie insgesamt als Objekt betrachten. Daher müssen die Punkte  $q(t)$  auf der Trajektorien  $q(\cdot)$  nicht notwendig in *synchroner* Weise entsprechenden Punkten  $\tilde{q}_\varepsilon(t)$  auf der Trajektorien  $q(\cdot)$  zugeordnet sein. Wir sprechen dann von *asynchroner* Variation:

$$\begin{aligned} \tilde{q}_\varepsilon(\tilde{t}_\varepsilon) &= q(t) + \varepsilon\eta(t) \\ \tilde{t}_\varepsilon(t) &= t + \varepsilon\tau(t) \end{aligned}$$

Für  $\varepsilon \ll 1$  folgt

$$\frac{d}{d\tilde{t}_\varepsilon} \tilde{q}_\varepsilon(\tilde{t}) = \frac{\frac{d}{d\tilde{t}} \tilde{q}_\varepsilon(\tilde{t})}{\frac{d}{d\tilde{t}} \tilde{t}_\varepsilon(t)} = \frac{\frac{d}{dt} [q(t) + \varepsilon\eta(t)]}{\frac{d}{dt} [t + \varepsilon\tau(t)]} = \frac{\dot{q}(t) + \varepsilon\dot{\eta}(t)}{1 + \varepsilon\dot{\tau}(t)} = \dot{q}(t) + \varepsilon [\dot{\eta}(t) - \dot{q}(t)\dot{\tau}(t)] + o(\varepsilon^2)$$

Hierbei sind  $\tau(t)$  und  $\eta(t) = [\eta_1(t), \dots, \eta_M(t)]$  beliebige (aber fest gewählte) Funktionen.

Wir berechnen jetzt die Änderung des Funktionals  $A[(q(\cdot); t_a, t_b)]$  für infinitesimale Werte des Parameters  $\varepsilon$ :

$$\begin{aligned} \Delta_\varepsilon A[q(\cdot)] &= A[\tilde{q}_\varepsilon(\cdot); \tilde{t}_\varepsilon(t_a), \tilde{t}_\varepsilon(t_b)] - A[q(\cdot); t_a, t_b] \\ &= \int_{t_a + \varepsilon\tau_a}^{t_b + \varepsilon\tau_b} d\tilde{t} \mathcal{L} \left[ \tilde{q}_\varepsilon(\tilde{t}), \frac{d}{d\tilde{t}} \tilde{q}_\varepsilon(\tilde{t}), \tilde{t} \right] - \int_{t_a}^{t_b} dt \mathcal{L} \left[ q(t), \frac{d}{dt} q(t), t \right] \\ &= \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{d}{dt} [t + \varepsilon\tau(t)] \mathcal{L} \left[ q(t) + \varepsilon\eta(t), \frac{\dot{q}(t) + \varepsilon\dot{\eta}(t)}{1 + \varepsilon\dot{\tau}(t)}, t + \varepsilon\tau(t) \right] - \int_{t_a}^{t_b} dt \mathcal{L} \left[ q(t), \frac{d}{dt} q(t), t \right] \\ &= \int_{t_a}^{t_b} dt [1 + \varepsilon\dot{\tau}(t)] \mathcal{L} [q(t) + \varepsilon\eta(t), \dot{q}(t) + \varepsilon [\dot{\eta}(t) - \dot{q}(t)\dot{\tau}(t)], t + \varepsilon\tau(t)] - \int_{t_a}^{t_b} dt \mathcal{L} \left[ q(t), \frac{d}{dt} q(t), t \right] + o(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

Es folgt die für kleine  $\varepsilon$  gültige Formel:

$$= \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon \int_{t_a}^{t_b} dt \dot{\tau}(t) \mathcal{L} [q(t), \dot{q}(t), t] + o(\varepsilon^2) \\ + \int_{t_a}^{t_b} dt \left( \begin{array}{l} \mathcal{L} [q(t) + \varepsilon\eta(t), \dot{q}(t) + \varepsilon [\dot{\eta}(t) - \dot{q}(t)\dot{\tau}(t)], t + \varepsilon\tau(t)] \\ - \mathcal{L} [q(t), \frac{d}{dt} q(t), t] \end{array} \right) + o(\varepsilon^2) \end{array} \right.$$

<sup>2</sup>Soll ein System vieler Teilchen beschrieben werden, so sind  $q_a$  und  $q_b$  die Vektoren der Position *aller* Lagekoordinaten aller Teilchen zur Zeit  $t = t_a$  bzw.  $t = t_b$ !



$$\begin{aligned}
&= \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon \int_{t_a}^{t_b} dt \dot{\tau}(t) \mathcal{L}[q(t), \dot{q}(t), t] + o(\varepsilon^2) \\ + \varepsilon \int_{t_a}^{t_b} dt \left( \sum_{j=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j(t)} \eta_j(t) + \sum_{j=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j(t)} [\dot{\eta}_j(t) - \dot{q}_j(t) \dot{\tau}(t)] + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \tau(t) \right) + o(\varepsilon^2) \end{array} \right. \\
&= \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon \int_{t_a}^{t_b} dt \mathcal{L}[q(t), \dot{q}(t), t] \dot{\tau}(t) + o(\varepsilon^2) \\ + \varepsilon \int_{t_a}^{t_b} dt \left( \sum_{j=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j(t)} \eta_j(t) + \sum_{j=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j(t)} \dot{\eta}_j(t) - \sum_{j=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j(t)} \dot{q}_j(t) \dot{\tau}(t) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \tau(t) \right) + o(\varepsilon^2) \end{array} \right. \\
&= \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon \int_{t_a}^{t_b} dt \left[ \mathcal{L}[q(t), \dot{q}(t), t] - \sum_{j=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j(t)} \dot{q}_j(t) \right] \dot{\tau}(t) + \varepsilon \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \tau(t) + o(\varepsilon^2) \\ + \varepsilon \int_{t_a}^{t_b} dt \left( \sum_{j=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j(t)} \eta_j(t) + \sum_{j=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j(t)} \dot{\eta}_j(t) \right) + o(\varepsilon^2) \end{array} \right.
\end{aligned}$$

Die beiden Terme proportional zu  $\dot{\eta}_j(t)$  und proportional zu  $\dot{\tau}(t)$  werden jetzt partiell integriert:

$$\Delta_\varepsilon A[q(\cdot)] = \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon \left[ \sum_{j=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j(t)} \eta_j(t) + \left( \mathcal{L}[q(t), \dot{q}(t), t] - \sum_{j=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j(t)} \dot{q}_j(t) \right) \tau(t) \right]_{t=t_a}^{t=t_b} \\ + \varepsilon \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ - \frac{d}{dt} \left[ \mathcal{L}[q(t), \dot{q}(t), t] - \sum_{j=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j(t)} \dot{q}_j(t) \right] + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \right\} \tau(t) \\ + \varepsilon \sum_{j=1}^M \int_{t_a}^{t_b} dt \left[ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j(t)} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j(t)} \right) \right] \eta_j(t) \\ + o(\varepsilon^2) \end{array} \right.$$

Die Forderung, dass bei infinitesimaler Variation der (noch zu bestimmenden) Bahn  $q_{cl}(t)$  gemäß  $q_{cl}(\cdot) \rightarrow q_{cl}(\cdot) + \varepsilon \eta(\cdot)$  die Korrekturterme  $\Delta_\varepsilon A[q_{cl}(\cdot)]$  des Wirkungsintegrals allenfalls von den Anfangswerten  $q_a = q(t_a)$  und Endwerten  $q_b = q(t_b)$  eines jeden Teilchens des Systems in linearer Ordnung bzgl.  $\varepsilon$  abhängig sein sollen,

$$\Delta_\varepsilon A[q_{cl}(\cdot)] \stackrel{!}{=} \varepsilon [G(t_b) - G(t_a)] + o(\varepsilon^2), \quad (6.2)$$

ergibt als Bestimmungsgleichung für eben diese spezielle Bahnkurve  $q_{cl}(t) = [q_{1,cl}(t), \dots, q_{M,cl}(t)]$  der Teilchen des Systems:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j(t)} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j(t)} \right) &= 0 \\
\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} - \frac{d}{dt} \left[ \mathcal{L}[q(t), \dot{q}(t), t] - \sum_{k=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k(t)} \dot{q}_k(t) \right] &= 0
\end{aligned}$$

Diese erste Zeile ist identisch mit den Lagrange'schen Bewegungsgleichungen, die zweite Zeile ist der Energiesatz! Als Lösung der Lagrange'schen Bewegungsgleichungen beschreibt die aus dem Prinzip der stationären Wirkung gewonnene Bahn  $q_{cl}(t)$  also tatsächlich die physikalische Bahn der Teilchen des Systems, u.z. in dem Sinne, dass  $q_{cl}(t)$  (transformiert auf kartesische Koordinaten) die Lösung der entsprechenden Newton'schen Bewegungsgleichungen ist. Aus dem Grund heißt  $q_{cl}(t)$  die *klassische Bahnkurve*. Das verallgemeinerte Wirkungsprinzip (6.2) ist nicht nur für die Mechanik, sondern auch für die Quantenmechanik von fundamentaler Bedeutung, wie Richard Feynman und Julian Schwinger gezeigt haben..

Unter Beachtung der Definitionen

$$p_k(t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k}$$

$$\mathcal{H} = \sum_{k=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k - \mathcal{L} = E$$

für den kanonischen Impuls und die Hamiltonfunktion erhält die zweite Gleichung die bekannte Gestalt:

$$\frac{d}{dt} \mathcal{H} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \quad (6.3)$$

womit gezeigt ist, dass die totale Ableitung der Energie nach der Zeit gleich der partiellen Ableitung der Lagrangefunktion des Systems ist. Daraus folgt unmittelbar, dass für konservative Systeme mit zeitunabhängigem Potential  $V(q)$  die Energie eine Erhaltungsgröße ist! Der bei der Variation um die klassische Bahn generierte Randterm hat die Gestalt:

$$\varepsilon [G(t_b) - G(t_a)], \quad (6.4)$$

wobei

$$\varepsilon G(t) = \sum_{j=1}^M p_j(t) \eta_j(t) - E(t) \tau(t)$$

$$\equiv \sum_{j=1}^M p_j \delta q_j - E \delta t$$

Das vorgestellte Prinzip der stationären Wirkung können wir somit kurz schreiben als:

$$\Delta_\varepsilon A [q_{cl}(\cdot)] = \left[ \sum_j p_{j,cl} \delta q_{j,cl} - E \delta t \right]_{t=t_a}^{t=t_b} + o(\varepsilon^2)$$

### Variationsprinzip von Maupertius und Euler

Unter der speziellen Voraussetzung, dass

- die Langrangefunktion  $\mathcal{L} = \mathcal{L}(q, \dot{q})$  nicht explizit von der Zeit  $t$  abhängig ist und
- die Variation der Eckdaten  $\delta q_j(t = t_a) = 0 = \delta q_j(t = t_b)$  ist,

folgt sofort

$$\Delta_\varepsilon A [q_{cl}(\cdot)] = -E(\delta t_b - \delta t_a) + o(\varepsilon^2), \quad (6.5)$$

wobei die Energie Erhaltungsgröße ist:  $E = \text{const.}$  Die Änderung der Wirkung bei Variation der klassischen Bahn ist für konstante Energie<sup>3</sup> und festgehaltene Anfangs- und Endpunkte der Bahn des Teilchens einfach das Produkt aus (fester) Energie  $E$  und Variation der Anfangs- und Endzeiten.

<sup>3</sup>Erinnere: **Isoenergetische Variationen**

Allgemein gilt für das Wirkungsintegral bei konstanter Energie

$$\begin{aligned} A &= \int_{t_a}^{t_b} dt \mathcal{L} = \int_{t_a}^{t_b} dt \left( \sum_{j=1}^M p_j \dot{q}_j - E \right) \\ &= \int_{t_a}^{t_b} dt \sum_{j=1}^M p_j \dot{q}_j - E(t_b - t_a) \end{aligned}$$

Für eine Variation der Bahn ergibt sich eine Änderung des Wirkungsintegrals  $\Delta_\varepsilon A$  wegen  $E = \text{const.}$  sofort zu

$$\Delta_\varepsilon A = \Delta_\varepsilon \left( \int_{t_a}^{t_b} dt \sum_{j=1}^M p_j \dot{q}_j \right) - E(\delta t_b - \delta t_a) + o(\varepsilon^2)$$

Eingangs haben wir für die Änderung der Wirkung bzgl. Variationen der physikalischen Bahnen der Teilchen mit der Nebenbedingung  $E = \text{const.}$  und festgehaltenen Eckdaten  $\delta q_j(t = t_a) = 0 = \delta q_j(t = t_b)$  das Ergebnis (6.5) erhalten. Ein Vergleich beider Formeln impliziert für isoenergetische Variationen  $\delta q$  der klassischen Bahn  $q_{cl}(t)$  nunmehr als Variationsprinzip:

$$\Delta_\varepsilon \left( \int_{t_a}^{t_b} dt \sum_{j=1}^M p_j \dot{q}_j \right) = o(\varepsilon^2)$$

Hier schließt sich der Kreis. Wir erhalten aus dem Gesagten unmittelbar die charakteristische Funktion von Hamilton (für Systeme mit  $M$  Freiheitsgraden) zurück, die wir bereits im ersten Kapitel zur Charakterisierung der Kinematik (für ein Teilchen) verwendet haben:

$$S(q_b, q_a; E, \alpha) = \int_{t_a}^{t_b} dt \sum_j p_j \dot{q}_j = \sum_j \int_{t_a}^{t_b} dt p_j \frac{dq_j}{dt} = \sum_j \int_{q_{j,a}}^{q_{j,b}} dq_j p_j$$

Dabei sind  $q_{j,a} = q_j(t_a)$  und  $q_{j,b} = q_j(t_b)$  vorgegebene Eckdaten.

Es folgt für isoenergetische Variationen das Variationsprinzip von Maupertius und Euler:

$$\Delta_\varepsilon S = \Delta_\varepsilon \left( \sum_j \int_{q_j(t_a)}^{q_j(t_b)} dq_j p_j \right) = o(\varepsilon^2)$$

### Prinzip von Fermat

Für Teilchen, die sich unter dem Einfluss konservativer zeitunabhängiger Kräfte bewegen, lautet die Lagrangefunktion

$$\mathcal{L} = K - V = \sum_{j,\alpha} \frac{m}{2} \dot{q}_{j,\alpha}^2 - V$$

Dann ist (wir betrachten hier der Einfachheit halber kartesische Koordinaten)

$$\sum_{j,\alpha} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_{j,\alpha}} \dot{q}_{j,\alpha} = \sum_{j,\alpha} p_{j,\alpha} \dot{q}_{j,\alpha} = 2 \sum_{j,\alpha} \frac{p_{j,\alpha}^2}{2m_j} = 2K$$

wobei  $\alpha = 1, 2, 3$  und  $j = 1, 2, \dots, N$  und  $K$  die kinetische Energie ist. Somit ist das Variationsprinzip von Maupertius und Euler äquivalent zu

$$\Delta_\varepsilon \left( \int_{t_a}^{t_b} dt K \right) = o(\varepsilon^2) \quad \text{bzw.} \\ \int_{t_a}^{t_b} dt K \stackrel{!}{=} \text{Extremum}$$

Wirken insbesondere keine äußeren Kräfte, so ist  $V = \text{const.}$ , und folglich ist mit  $E = \text{const.}$  auch  $K = \text{const.}$ , also:

$$\Delta_\varepsilon \left( \int_{t_a}^{t_b} dt \cdot K \right) = K \cdot \Delta_\varepsilon \left( \int_{t_a}^{t_b} dt \right) = o(\varepsilon^2)$$

Diese Formel entspricht dem Fermatschen Prinzip:

$$\int_{t_a}^{t_b} dt = \text{Extremum}$$

### 6.3 Variationsprinzip für Hamiltonsche Bewegungsgleichungen

Nachdem wir im letzten Abschnitt sowohl die Existenz einer Energiefunktion, die mit der Hamiltonfunktion identisch ist, als auch die Existenz der Euler-Lagrange'schen Bewegungsgleichungen aus dem Stationaritätsprinzip der klassischen Wirkung bzgl. asynchroner Variationen folgern konnten, wenden wir uns nun den Hamilton'schen Bewegungsgleichungen zu und untersuchen, ob sich diese auch aus einem Variationsprinzip ableiten lassen. Die Hamiltonfunktion haben wir definiert (und im vorangegangenen Abschnitt auch hergeleitet) als

$$\mathcal{H} [q(t), p(t), t] = \sum_j p_j(t) \dot{q}_j(t) - \mathcal{L} [q(t), \dot{q}(q, p, t), t]$$

Umgekehrt ist es deshalb auch möglich, die Lagrangefunktion und damit auch das Wirkungsfunktional nicht als Funktion von  $q(t)$ ,  $\dot{q}(t)$  und  $t$ , sondern als Funktion von  $q(t)$ ,  $p(t)$  und  $t$  aufzufassen:

$$\mathcal{L} = \sum_j p_j \dot{q}_j - \mathcal{H}(q, p, t) \quad (6.6) \\ A[q(\cdot), p(\cdot); t_a, t_b] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left( \sum_j p_j \dot{q}_j - \mathcal{H} \right)$$

Bei einer Variation der klassischen Trajektorie  $[q(t), p(t)]$  im Phasenraum gemäß

$$\begin{aligned} \tilde{q}(\tilde{t}_\varepsilon) &= q(t) + \varepsilon \eta(t) \\ \tilde{p}(\tilde{t}_\varepsilon) &= p(t) + \varepsilon \chi(t) \\ \tilde{t}_\varepsilon &= t + \varepsilon \tau(t) \end{aligned}$$

ändert sich das Wirkungsintegral  $A$  entsprechend um:

$$\frac{d}{d\tilde{t}_\varepsilon} q_\varepsilon(\tilde{t}) = \frac{\frac{d}{dt} q_\varepsilon(\tilde{t})}{\frac{d}{dt} \tilde{t}_\varepsilon(t)} = \frac{\frac{d}{dt} [q(t) + \varepsilon \eta(t)]}{\frac{d}{dt} [t + \varepsilon \tau(t)]} = \frac{\dot{q}(t) + \varepsilon \dot{\eta}(t)}{1 + \varepsilon \dot{\tau}(t)} = \dot{q}(t) + \varepsilon [\dot{\eta}(t) - \dot{q}(t) \dot{\tau}(t)] + o(\varepsilon^2)$$

$$\begin{aligned}
\Delta_\varepsilon A &= \int_{t_a + \varepsilon\tau_a}^{t_b + \varepsilon\tau_b} d\tilde{t} \left[ \sum_j \tilde{p}_j \frac{d}{d\tilde{t}} \tilde{q}_j - \mathcal{H}(\tilde{q}, \tilde{p}, \tilde{t}) \right] - \int_{t_a}^{t_b} dt \left( \sum_j p_j \dot{q}_j - \mathcal{H} \right) \\
&= \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{d\tilde{t}_\varepsilon}{dt} \left[ \sum_j \tilde{p}_j \frac{d}{d\tilde{t}_\varepsilon} \tilde{q}_j - \mathcal{H}(\tilde{q}, \tilde{p}, \tilde{t}) \right] - \int_{t_a}^{t_b} dt \left( \sum_j p_j \dot{q}_j - \mathcal{H} \right) \\
&= \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{d}{dt} [t + \varepsilon\tau(t)] \left[ \begin{array}{c} \sum_j [p_j(t) + \varepsilon\chi_j(t)] \frac{\dot{q}_j(t) + \varepsilon\dot{\eta}_j(t)}{1 + \varepsilon\dot{\tau}(t)} \\ - \mathcal{H}(q(t) + \varepsilon\eta(t), p(t) + \varepsilon\chi(t), t + \varepsilon\tau(t)) \end{array} \right] - \int_{t_a}^{t_b} dt \left( \sum_j p_j \dot{q}_j - \mathcal{H} \right) \\
&= \int_{t_a}^{t_b} dt [1 + \varepsilon\dot{\tau}(t)] \left[ \begin{array}{c} \sum_j [p_j(t) + \varepsilon\chi_j(t)] [\dot{q}_j(t) + \varepsilon[\dot{\eta}_j(t) - \dot{q}_j(t)\dot{\tau}(t)] + o(\varepsilon^2)] \\ - \mathcal{H}(q(t) + \varepsilon\eta(t), p(t) + \varepsilon\chi(t), t + \varepsilon\tau(t)) \end{array} \right] - \int_{t_a}^{t_b} dt \left( \sum_j p_j \dot{q}_j - \mathcal{H} \right) \\
&= \varepsilon \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \begin{array}{c} \dot{\tau}(t) \left( \sum_j p_j \dot{q}_j - \mathcal{H} \right) \\ + \left( \begin{array}{c} \sum_j [p_j(t) + \varepsilon\chi_j(t)] [\dot{q}_j(t) + \varepsilon[\dot{\eta}_j(t) - \dot{q}_j(t)\dot{\tau}(t)]] \\ - p_j(t)\dot{q}_j(t) \\ + \mathcal{H}(q, p, t) - \mathcal{H}(q(t) + \varepsilon\eta(t), p(t) + \varepsilon\chi(t), t + \varepsilon\tau(t)) \end{array} \right) \end{array} \right\} + o(\varepsilon^2) \\
&= \varepsilon \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \begin{array}{c} \dot{\tau}(t) \left[ \sum_j p_j(t)\dot{q}_j(t) - \mathcal{H} \right] \\ + \left( \begin{array}{c} \sum_j [p_j(t) [\dot{\eta}_j(t) - \dot{q}_j(t)\dot{\tau}(t)] + \chi_j(t)\dot{q}_j(t)] \\ - \sum_j \left[ \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_j} \eta_j(t) + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j} \chi_j(t) \right] - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} \tau(t) \end{array} \right) \end{array} \right\} + o(\varepsilon^2)
\end{aligned}$$

Partielle Integration der Terme proportional zu  $\dot{\tau}(t)$  und  $\dot{\eta}_j(t)$  ergibt:

$$= \left\{ \begin{array}{c} \varepsilon \left[ \sum_j p_j(t)\eta_j(t) - \tau(t)\mathcal{H} \right]_{t=t_a}^{t=t_b} \\ + \varepsilon \int_{t_a}^{t_b} dt \left( \begin{array}{c} - \sum_j \left[ p_j(t) + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_j} \right] \eta_j(t) \\ + \sum_j \left[ \dot{q}_j(t) - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j} \right] \chi_j(t) \\ + \left[ \frac{d}{dt} \mathcal{H} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} \right] \tau(t) \end{array} \right) \end{array} \right\} + o(\varepsilon^2)$$

Aus der Forderung, dass für Variationen um die klassische Bahn für die Änderung des Wirkungsintegrals  $\Delta_\varepsilon A$  nur Randterme in der linearen Ordnung  $\varepsilon$  verbleiben sollen, folgen dann ohne Weiteres zum Einen die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen zur Bestimmung der klassischen Bahn  $[q_{cl}(t), p_{cl}(t)]$  im Phasenraum,

$$\dot{p}_j = - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_j} \quad (6.7)$$

$$\dot{q}_j = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j} \quad (6.8)$$

und zum Anderen der (im letzten Abschnitt in etwas anderer Form erhaltene) Energiesatz:

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t}$$

Hängt die Hamiltonfunktion  $\mathcal{H}$  nicht explizit von der Zeit ab, ist  $\mathcal{H}$  Konstante der Bewegung und man hat Erhaltung der Energie:  $\mathcal{H} = E = \text{const.}$ , wie gehabt.

Der in  $\varepsilon$  verbleibende lineare Randterm beschreibt nach dem Gesagten die Änderung von  $A$  bei Variation um die klassische Bahn  $[q_{cl}(t), p_{cl}(t)]$  im Phasenraum. Mit der oft verwendeten Bezeichnungsweise

$$\delta q_j = \varepsilon \eta_j, \delta p_j = \varepsilon \chi_j, \delta t = \varepsilon \tau \quad (6.9)$$

folgt dann:

$$\begin{aligned} \Delta_\varepsilon A &= \left[ \sum_j p_j \delta q_j - \mathcal{H} \delta t \right]_{t=t_a}^{t=t_b} + o(\varepsilon^2) \\ &= \sum_j p_{j,b} \delta q_{j,b} - \sum_j p_{j,a} \delta q_{j,a} - \mathcal{H}(t_b) \delta t_b + \mathcal{H}(t_a) \delta t_a + o(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

Andererseits ist  $A$  von den Eckdaten  $q_{j,a}$ ,  $q_{j,b}$  und  $t_a$ ,  $t_b$  abhängig:

$$\Delta_\varepsilon A = \sum_j \frac{\partial A}{\partial q_{j,b}} \delta q_{j,b} + \sum_j \frac{\partial A}{\partial q_{j,a}} \delta q_{j,a} + \frac{\partial A}{\partial t_b} \delta t_b + \frac{\partial A}{\partial t_a} \delta t_a + o(\varepsilon^2)$$

Hieraus ergibt sich durch Vergleich sofort der Anschluss an unsere Feststellungen im zweiten Kapitel, nämlich dass der Impuls der Gradient der Wirkung ist. Diese Aussage folgt jetzt direkt (und allgemein) aus der obigen Gleichung:

$$\begin{aligned} p_{j,b} &= p_j(t_b) = \frac{\partial A}{\partial q_j(t_b)} = \frac{\partial A}{\partial q_{j,b}} \\ p_{j,a} &= p_j(t_a) = -\frac{\partial A}{\partial q_j(t_a)} = -\frac{\partial A}{\partial q_{j,a}} \end{aligned}$$

Des Weiteren ergibt sich sofort der Zusammenhang:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(q_b, p_b, t_b) &= -\frac{\partial A}{\partial t_b} \\ \mathcal{H}(q_a, p_a, t_a) &= \frac{\partial A}{\partial t_a} \end{aligned}$$

Einsetzen der obigen kanonischen Impulse in ihrer Gestalt als Gradient der Wirkung impliziert sofort die sog. *Hamilton-Jacobi-Gleichung*:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}\left(q_b, \frac{\partial A}{\partial q_b}, t_b\right) + \frac{\partial A}{\partial t_b} &= 0 \\ \mathcal{H}\left(q_a, -\frac{\partial A}{\partial q_a}, t_b\right) - \frac{\partial A}{\partial t_a} &= 0 \end{aligned} \quad (6.10)$$

Für  $\mathcal{H}(q_b, p_b, t_b) = E = \mathcal{H}(q_a, p_a, t_a)$  mit  $E = \text{const.}$  besagt diese Beziehung, dass die Energie  $E$  die zeitl. Ableitung der Wirkung ist. Dann ist

$$A = E(t_a - t_b) \quad (6.11)$$

### Beispiel

Sei  $\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(q)$ . Dann folgt aus der Hamilton-Jacobi-Gleichung (6.10), dass

$$\frac{1}{2m} \left( \frac{\partial A}{\partial q} \right)^2 + V(q) = E$$

Für die Bedingung  $E = \text{const}$  wurde im vorletzten Abschnitt das Prinzip von Euler-Maupertius begründet:

$$\Delta_\varepsilon \int_{t_a}^{t_b} dt \cdot K = o(\varepsilon^2)$$

Sei nun

$$K = \frac{1}{2} \sum_{j,j'} m_{jj'} \frac{dq_j(t)}{dt} \frac{dq_{j'}(t)}{dt}$$

wobei  $m_{jj'}$  das Element aus der  $j$ -ten Zeile und  $j'$ -ten Spalte einer Massenmatrix ist. Dann führen wir eine Metrik ein:

$$(ds)^2 = \sum_{j,j'} m_{jj'} dq_j(t) dq_{j'}(t)$$

und erhalten so für die kinetische Energie

$$K = \frac{1}{2} \frac{(ds)^2}{(dt)^2} \Rightarrow (dt)^2 = \frac{(ds)^2}{2K}$$

Also gilt für die Variation

$$\Delta_\varepsilon \int_{t_a}^{t_b} dt K = \Delta_\varepsilon \left( \int_{t_a}^{t_b} ds \frac{K}{\sqrt{2K}} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Delta_\varepsilon \int_{t_a}^{t_b} ds \sqrt{K}$$

woraus mit  $K = H - V(q)$  und  $H = E = \text{const}$ . schließlich folgt:

$$\Delta_\varepsilon \int_{t_a}^{t_b} ds \sqrt{E - V(q)} = o(\varepsilon^2)$$

Die Änderung dieses Integrals infolge einer isoenergetischen Variation der klassischen Bahn gemäß  $q_{cl}(\cdot) \rightarrow q_{cl}(\cdot) + \varepsilon \eta(\cdot)$  ist notwendig von zweiter Ordnung klein in  $\varepsilon$ . Die Bedingung, dass der Term erster Ordnung in  $\varepsilon$  identisch Null sein muss, impliziert schließlich eine Bestimmungsgleichung für die physikalische Bahn  $q_{cl}(s)$ .

## 6.4 Kanonische Transformationen und ihre Erzeugenden

Aus den Überlegungen, die wir im Kapitel **Invarianz der Lagrange-Bewegungsgleichungen unter Koordinatentransformationen** angestellt haben, hatte sich ergeben, dass die Lagrange-Bewegungsgleichungen unter Punkttransformationen  $Q_k = Q_k(q, t)$  ihre Form beibehalten, d.h.

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} = 0 \iff \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}}{\partial \dot{Q}_k} \right) - \frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}}{\partial Q_k} = 0,$$

wobei die transformierte Lagrangefunktion aus der ursprünglichen Lagrangefunktion durch Substitution hervorgeht:

$$\tilde{\mathcal{L}}(Q, \dot{Q}, t) = \tilde{\mathcal{L}}(Q(q, t), \dot{Q}(q, \dot{q}, t), t) = \mathcal{L}(q, \dot{q}, t)$$

Der zugeordnete generalisierte Impuls besitzt dann folgendes Transformationsverhalten:

$$P_k = \frac{\partial \widetilde{\mathcal{L}}}{\partial \dot{Q}_k} = \sum_j \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} \underbrace{\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial \dot{Q}_k}}_{A_{jk}} = \sum_j p_j A_{jk}(q, t)$$

$A_{jk}$  ist dabei das  $j, k$ -te Element der Matrix der Ableitungen  $\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial \dot{Q}_k}$ . Wie man sieht, sind die neuen Impulse  $P_k$  lineare Funktionen der ursprünglichen Impulse  $p_j$ . Demgegenüber sind die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen unter den *viel* allgemeineren kanonischen Transformationen<sup>4</sup>

$$Q_k = Q_k(q, p) \qquad P_k = P_k(q, p)$$

$$\begin{pmatrix} dQ \\ dP \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} dq \\ dp \end{pmatrix}$$

invariant, vorausgesetzt die Funktionalmatrix  $\mathcal{M}$  der erzeugenden Abbildung ist symplektisch, d.h.  $\mathcal{M} \varepsilon \mathcal{M}^T = \varepsilon$ . Insbesondere dürfen bei allgemeinen kanonischen Transformationen die neuen Impulse  $P_k$  selbstverständlich auch *nicht* lineare Funktionen der alten Koordinaten  $q_j$  und der alten Impulse  $p_j$  sein.

Für kanonische Transformationen gilt dann bzgl. der alten Hamiltonfunktion  $\mathcal{H} = H(q, p, t)$  und der neuen Hamiltonfunktion  $\widetilde{\mathcal{H}}(Q, P, t)$  die Forminvarianz der Bewegungsgleichungen:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{q}_k = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k} \\ \dot{p}_k = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_k} \end{array} \right\} \iff \left\{ \begin{array}{l} \dot{Q}_k = \frac{\partial \widetilde{\mathcal{H}}}{\partial P_k} \\ \dot{P}_k = -\frac{\partial \widetilde{\mathcal{H}}}{\partial Q_k} \end{array} \right\}$$

Wir nehmen die Existenz der Umkehrabbildung der erzeugenden Funktion an, d.h. wir denken uns die Variablen  $q_k$  und  $p_k$  ausgedrückt durch  $Q_k$  und  $P_k$  und setzen die Ausdrücke in die Hamiltonfunktion  $H(q, p)$  ein. Wie wir gleich sehen werden, gilt für die neue Hamilton-Funktion von  $Q_k$  und  $P_k$  die Substitutionsregel

$$\widetilde{\mathcal{H}}(Q, P) = \mathcal{H}[q(Q, P), p(Q, P)] \tag{6.12}$$

aber nur dann, wenn keine explizite Zeitabhängigkeit vorliegt! Im Allgemeinen gilt der Zusammenhang:

$$\widetilde{\mathcal{H}}(Q, P, t) = \mathcal{H}[q(Q, P), p(Q, P), t] + \frac{\partial}{\partial t} F_1(q, Q, t)$$

Die neuen Bewegungsgleichungen für die transformierten Variablen  $Q_k$  und  $P_k$  lassen sich aus der Hamiltonfunktion  $\widetilde{\mathcal{H}}(Q, P)$  aus einem Variationsprinzip mit der entsprechend transformierten Wirkung

$$\tilde{A} = \int_{t_a}^{t_b} dt \left( \sum_j \dot{P}_j \dot{Q}_j - \widetilde{\mathcal{H}} \right)$$

herleiten. Fügt man eine *totale* zeitliche Ableitung

$$\frac{d}{dt} \mathcal{F}_1(q, Q, t)$$

einer Funktion  $\mathcal{F}_1(q, Q, t)$  hinzu, so ändert dies die Stationsaritätseigenschaften des Funktionals nicht. Die Forderung

$$\Delta_\varepsilon \tilde{A} = o(\varepsilon^2)$$

<sup>4</sup>Die kanonischen Transformationen sind im Allgemeinen nicht linear.



impliziert dann die kanonischen Bewegungsgleichungen zur Bestimmung der klassischen Bahn, ausgedrückt durch die neuen Koordinaten  $Q_{cl}(t)$  und  $P_{cl}(t)$ ! Da sich die Ausdrücke

$$\sum_j p_j \dot{q}_j - \mathcal{H} \quad \text{und} \quad \sum_j P_j \dot{Q}_j - \widetilde{\mathcal{H}}$$

nur um eine totale Zeitableitung unterscheiden, folgt aus dem Variationsprinzip für die Wirkung  $A$  das entsprechende Variationsprinzip für die Wirkung  $\tilde{A}$ . Da sich bei derart allgemeinen Transformationen die Bedeutung der  $P_k$  und  $Q_k$  als „Impuls“ und „Lagekoordinate“ vermischt, bezeichnet man  $(Q_k, P_k)$  gemeinsam als Paar von kanonisch konjugierten Variablen. Nach dem Gesagten folgt

$$\sum_j p_j \dot{q}_j - \mathcal{H} = \sum_j P_j \dot{Q}_j - \widetilde{\mathcal{H}} + \frac{d}{dt} \mathcal{F}_1(q, Q, t)$$

Durch Multiplikation mit  $dt$  erhält man

$$\sum_j p_j dq_j - \mathcal{H} dt = \sum_j P_j dQ_j - \widetilde{\mathcal{H}} dt + d\mathcal{F}_1$$

Bildung des totalen Differentials der Funktion  $\mathcal{F}_1$  ergibt

$$d\mathcal{F}_1 = \sum_j \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial q_j} dq_j + \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial Q_j} dQ_j + \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial t} dt$$

Setzt man nun (6.4) ein, erhält man nach elementarer Umformung:

$$\sum_j \left( p_j - \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial q_j} \right) dq_j - \sum_j \left( P_j + \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial Q_j} \right) dQ_j + \left( \widetilde{\mathcal{H}} - \mathcal{H} - \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial t} \right) dt = 0$$

Somit ist  $\mathcal{F}_1(q, Q, t)$  die erzeugende Funktion einer kanonischen Transformation:

$$\begin{aligned} p_j &= \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial q_j} \\ P_j &= -\frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial Q_j} \\ \widetilde{\mathcal{H}} &= \mathcal{H} + \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial t} \end{aligned}$$

Anstelle von

$$\sum_j p_j \dot{q}_j - \mathcal{H}(q, p, t)$$

kann man genauso gut als Variationsprinzip den Ausdruck

$$\sum_j -\dot{p}_j q_j - \mathcal{H}(q, p, t)$$

verwenden, um die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen aus einem Variationsprinzip herzuleiten. Entsprechend können wir anstelle von

$$\sum_j P_j \dot{Q}_j - \widetilde{\mathcal{H}}$$

den Ausdruck

$$\sum_j -\dot{P}_j Q_j - \tilde{\mathcal{H}}$$

verwenden, um wiederum Hamilton'schen Bewegungsgleichungen für die neuen transformierten Variablen  $Q_j$  und  $P_j$  aus einem Variationsprinzip zu gewinnen. Damit erhalten wir jetzt einen sehr klaren und einfachen Zugang zur Konstruktion von erzeugenden Funktionen kanonischer Transformationen. Bei Beschränkung auf isochrone Variationen gibt es nach dem Gesagten neben  $F_1(q, Q, t)$  drei weitere erzeugende Funktionen, nämlich  $F_2(q, P, t)$ ,  $F_3(p, Q, t)$  und  $F_4(p, P, t)$ . Die erzeugenden Funktionen  $F_1(q, Q, t)$ ,  $F_2(q, P, t)$ ,  $F_3(p, Q, t)$  und  $F_4(p, P, t)$  wurden bereits im vorhergehenden Kapitel diskutiert, wo auch eine Tabelle mit den wichtigsten Merkmalen angegeben ist!

## 6.5 Noethersches Theorem

Sei  $q_k(t)$  eine physikalische „Bahnkurve“<sup>5</sup>, d.h. es gelten die Lagrange'schen Bewegungsgleichungen für eine Lagrange-Funktion  $\mathcal{L}(q, \frac{d}{dt}q, t)$

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} = 0.$$

Wie schon eingangs geschehen, betrachten wir *asynchrone* Variationen in Ort und Zeit. Das heißt, dass der zeitliche Ablauf auf einer Nachbarbahn  $\tilde{q}_{k,\varepsilon}(\cdot)$  nicht unbedingt *synchron* zur betrachteten Bahn  $q_k(\cdot)$  verlaufen muss:

$$\begin{aligned} \tilde{q}_\varepsilon(\tilde{t}) &= q(t) + \varepsilon \eta[q(t), t] \\ \tilde{t}_\varepsilon &= t + \varepsilon \tau[q(t), t]. \end{aligned} \quad (6.13)$$

$$\begin{aligned} \dot{\tau} &= \sum_k \frac{\partial \tau}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial \tau}{\partial t} \\ \dot{\eta}_k &= \sum_k \frac{\partial \eta_k}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial \eta_k}{\partial t} \end{aligned}$$

Für  $\varepsilon \ll 1$  folgt

$$\frac{d}{d\tilde{t}} q_{k,\varepsilon}(\tilde{t}) = \frac{\frac{d}{dt} q_{k,\varepsilon}(\tilde{t})}{\frac{d}{d\tilde{t}} \tilde{t}_\varepsilon} = \frac{\dot{q}_k(t) + \varepsilon \dot{\eta}_k(t)}{1 + \varepsilon \dot{\tau}(t)} = \dot{q}_k(t) + \varepsilon [\dot{\eta}_k(t) - \dot{q}_k(t) \dot{\tau}(t)] + o(\varepsilon^2)$$

Wir betrachten nun eine spezielle Variation  $\eta_k(t)$  und  $\tau(t)$  mit der Eigenschaft, dass

$$\mathcal{L}(\tilde{q}_\varepsilon, \frac{d}{d\tilde{t}} q_\varepsilon(\tilde{t}), \tilde{t}_\varepsilon) d\tilde{t}_\varepsilon - \mathcal{L}(q, \frac{d}{dt} q, t) dt = \varepsilon \cdot d\Lambda(q, t) + o(\varepsilon^2) \quad (6.14)$$

Es wird demnach verlangt, dass die Differenz zweier Elemente des Wirkungsintegrals  $\mathcal{L} d\tilde{t}$  und  $\mathcal{L}$  in erster Ordnung bzgl.  $\varepsilon$  das totale Differential einer Funktion  $\Lambda(q, t)$  ist, über die im allgemeinen Fall zunächst nicht weiter verfügt wird. Diese Freiheit kann im konkreten Fall geschickt genutzt werden, um neue Invarianten bzw. Konstanten der Bewegung für ein spezifisches System zu konstruieren.

<sup>5</sup>Es ist anzumerken, dass  $q_k(t)$  die Trajektorie aller beteiligten Teilchen des Systemes darstellt.  $q_k(t)$  ist also im Allgemeinen ein sehr hochdimensionaler Vektor.

Wir schreiben die ursprüngliche Forderung um zu

$$\mathcal{L}(\tilde{q}, \frac{d}{dt}\tilde{q}, \tilde{t}) \frac{d\tilde{t}}{dt} - \mathcal{L}(q, \frac{d}{dt}q, t) = \varepsilon \cdot \frac{d\Lambda}{dt} + o(\varepsilon^2)$$

Mit (6.13) erhält man, eingesetzt in (6.14):

$$\begin{aligned} & \mathcal{L}[q(t) + \varepsilon\eta(t), \dot{q}(t) + \varepsilon[\dot{\eta}(t) - \dot{q}(t)\dot{\tau}(t)], t + \varepsilon\tau(t)] \cdot [1 + \varepsilon\dot{\tau}(t)] - \mathcal{L}(q, \frac{d}{dt}q, t) \\ & \stackrel{!}{=} \varepsilon \frac{d\Lambda(q, t)}{dt} + o(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

Also

$$\varepsilon \left\{ \sum_{k=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} \eta_k(t) + \sum_{k=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} [\dot{\eta}_k(t) - \dot{q}_k(t)\dot{\tau}(t)] + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \tau(t) + \mathcal{L} \dot{\tau}(t) - \frac{d\Lambda(q, t)}{dt} \right\} = o(\varepsilon^2) \quad (6.15)$$

Wir nutzen jetzt aus, dass die Bahnen  $q_k(t)$  Lösungen der Lagrange'schen Bewegungsgleichungen sind,

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k(t)} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k(t)} = 0 \quad (6.16)$$

und erhalten nach Division durch  $\varepsilon > 0$ :

$$\begin{aligned} o(\varepsilon) &= \sum_{k=1}^M \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k(t)} \right) \eta_k(t) + \sum_{k=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} [\dot{\eta}_k(t) - \dot{q}_k(t)\dot{\tau}(t)] + \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} - \frac{d\mathcal{L}}{dt} \right) \tau(t) + \frac{d}{dt} [\mathcal{L} \tau(t) - \Lambda] \\ &= \frac{d}{dt} \underbrace{\left\{ \sum_{k=1}^M \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k(t)} \right) \eta_k(t) + \mathcal{L} \tau(t) - \Lambda \right\}}_{\equiv C} - \sum_{k=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k(t)\dot{\tau}(t) + \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} - \frac{d\mathcal{L}}{dt} \right) \tau(t) \\ &= C - \sum_{k=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k(t)\dot{\tau}(t) - \left( \sum_{k=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} \dot{q}_k(t) + \sum_{k=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \ddot{q}_k(t) \right) \tau(t) \\ &= C - \sum_{k=1}^M \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k(t)\dot{\tau}(t) + \left[ \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k(t)} \right) \dot{q}_k(t) + \sum_{k=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \ddot{q}_k(t) \right] \tau(t) \right\} \\ &= C - \sum_{k=1}^M \left\{ \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k(t) \right) \dot{\tau}(t) + \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k(t)} \dot{q}_k(t) \right) \tau(t) \right\} \\ &= C - \frac{d}{dt} \left\{ \sum_{k=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k(t) \tau(t) \right\} \\ &= \frac{d}{dt} \left\{ \sum_{k=1}^M \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k(t)} \right) [\eta_k(t) - \dot{q}_k(t)\tau(t)] + \mathcal{L} \tau(t) - \Lambda(q, t) \right\} \end{aligned}$$

Integration nach der Zeit liefert nunmehr für  $\varepsilon \rightarrow 0$ , dass die Kombination

$$I(t) = \sum_{k=1}^M \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k(t)} [\eta_k(t) - \dot{q}_k(t)\tau(t)] + \mathcal{L}[q(t), \dot{q}(t), t] \cdot \tau(t) - \Lambda(q, t)$$

eine Erhaltungsgröße ist:

$$\frac{d}{dt} I(t) = 0 \quad (6.17)$$

Die Erhaltungsgröße  $I(t)$  nennt man Noether Invariante. Spezielle Fälle ergeben sich für spezifische Wahl der Funktionen  $\eta_k(t)$ ,  $\tau(t)$  und  $\Lambda(q, t)$ .

### 6.5.1 Energieerhaltung

Wir betrachten ein System, dessen Lagrangefunktion  $\mathcal{L} = \mathcal{L}(q, \dot{q})$  nicht explizit zeitabhängig ist, d.h.  $\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{L} = 0$ . Wählt man  $\tau(t)$  konstant und  $\Lambda = \eta_k = 0$ , erhält man für die totale zeitliche Ableitung von  $I(t)$  die Aussage:

$$0 = \frac{d}{dt}I = \frac{d}{dt} \left[ \tau \left( \sum_k \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k - \mathcal{L} \right) \right] = \tau \frac{d}{dt}H$$

Es folgt, dass

$$E = H = \sum_k p_k \dot{q}_k - \mathcal{L}$$

eine Erhaltungsgröße ist. Ist ein System invariant bzgl. infinitesimaler Translationen in der Zeit,  $t \rightarrow t + \varepsilon\tau$ , so impliziert dies den *Energieerhaltungssatz*.

### 6.5.2 Impulserhaltung

Für das nächste Beispiel sei  $\mathcal{L}(q, \dot{q}, t)$  die Lagrangefunktion des Systems. Der Einfachheit halber betrachten wir kartesische Lagekoordinaten. Wir wählen für  $\alpha = 1, 2, 3$  nun  $\eta_{n,\alpha} = s_\alpha = \text{const.}$  für alle  $n = 1, 2, \dots, N$ . Ferner wählen wir  $\tau = 0$  (kein unterschiedlicher zeitlicher Ablauf auf verschiedenen Bahnen) sowie  $\Lambda = 0$ . Als Resultat so einer konstanten Verrückung des Gesamtsystems um den Vektor  $\mathbf{s} = (s_1, s_2, s_3)$  erhält man:

$$0 = \frac{d}{dt}I = \sum_\alpha s_\alpha \frac{d}{dt} \left( \sum_n \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_{n,\alpha}} \right)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_{n,\alpha}} = p_{n,\alpha} = \text{Impulskomponente } \alpha \text{ des } n\text{-ten Teilchens}$$

$$\sum_n p_{n,\alpha} = \text{const.}$$

Es folgt, dass  $P_\alpha = \sum_n p_{n,\alpha} = \text{const.}$  Erhaltungsgröße ist. Die Invarianz eines Systems unter infinitesimalen Translationen im Ort,  $q_{k,\alpha} \rightarrow q_{k,\alpha} + \varepsilon s_\alpha$ , impliziert die Erhaltung des Gesamtimpulses  $\mathbf{P}$  des Systems.

### 6.5.3 Drehimpulserhaltung

Als Nächstes betrachten wir ein System mit der Lagrangefunktion

$$L = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{2} \langle \dot{\mathbf{r}}_j, \dot{\mathbf{r}}_j \rangle - V(|\mathbf{r}_j|)$$

wobei  $|\mathbf{r}_j| = \sqrt{\langle \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_j \rangle}$ . Wir wählen jetzt

$$\eta_{j,\alpha} = (\hat{n} \wedge \mathbf{r}_j)_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{n}_\alpha \wedge \mathbf{r}_{j,\beta}$$

$$\tilde{\mathbf{r}}_{j,\alpha} = \mathbf{r}_{j,\alpha} + \varepsilon \eta_{j,\alpha}$$

$$\tau = 0 = \Lambda$$

wobei  $\hat{n}$  ein Einheitsvektor ist. Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} I = \frac{d}{dt} \left( \sum_{j,\alpha} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{j,\alpha}} \eta_{j,\alpha}(t) \right) = \sum_j \langle m \dot{\mathbf{r}}_j, \hat{n} \wedge \mathbf{r}_j \rangle \\ &= \sum_j \langle \hat{n}, \mathbf{r}_j \wedge m \dot{\mathbf{r}}_j \rangle = \langle \hat{n}, \sum_j \mathbf{r}_j \wedge m \dot{\mathbf{r}}_j \rangle \end{aligned}$$

Da die Drehachse  $\hat{n}_\alpha$  beliebig wählbar ist, impliziert dies, dass  $\mathbf{L} = \sum_k \mathbf{r}_k \wedge \mathbf{p}_k$  eine Erhaltungsgröße für Systeme mit rotationssymmetrischem Potential  $V = V(|\mathbf{r}|)$  ist. Invarianz des Systems unter infinitesimalen Drehungen um eine beliebig orientierte Drehachse impliziert die Erhaltung des Gesamtdrehimpulses  $\mathbf{L}$ .

### 6.5.4 System mit helikaler Symmetrie

Wir betrachten ein Teilchen mit Lagrangefunktion

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2} \langle \dot{\mathbf{r}}, \dot{\mathbf{r}} \rangle - V_0 \arctan\left(\frac{r_2}{r_1}\right) + D \cdot r_3,$$

wobei die Position des Teilchens in einem kartesischen Koordinatensystem zu  $\mathbf{r} = r_1 \hat{e}_1 + r_2 \hat{e}_2 + r_3 \hat{e}_3$  gegeben ist. Wir zeigen jetzt, dass  $\mathcal{L}$  invariant unter einer *helikalen* Transformation („Spiraltransformation“)

$$\begin{aligned} \tilde{r}_1 &= r_1 \cos \alpha - r_2 \sin \alpha \\ \tilde{r}_2 &= r_1 \sin \alpha + r_2 \cos \alpha \\ \tilde{r}_3 &= r_3 + s \cdot \alpha \end{aligned}$$

invariant bleibt. Aus der dritten Gleichung ist ersichtlich, dass es sich bei der Transformation  $\mathbf{r} \mapsto \tilde{\mathbf{r}}$  um einen vom Drehwinkel  $\alpha$  abhängigen Shift des Koordinatensystems in Richtung der  $r_3$ -Achse mit simultaner Rotationsbewegung handelt, so dass man in den neuen Koordinaten mit wachsendem  $\alpha$  auf einer Spirale läuft, deren Steigung wir zu  $s = \frac{V_0}{D}$  wählen wollen (diese spezielle Wahl wird weiter unten gerechtfertigt). Sei nun  $\alpha$  von der Zeit  $t$  unabhängig. Dann gilt für die neuen Koordinaten

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{r}}_1^2 + \dot{\tilde{r}}_2^2 &= \dot{r}_1^2 + \dot{r}_2^2 \\ \dot{\tilde{r}}_3 &= \dot{r}_3. \end{aligned}$$

Es bieten sich somit Zylinderkoordinaten zur weiteren Behandlung der Kinematik des Teilchens an:

$$\begin{aligned} \varrho(t) &= \sqrt{r_1^2 + r_2^2} & r_1(t) &= \varrho(t) \cos \varphi(t) \\ \varphi(t) &= \arctan \frac{r_2(t)}{r_1(t)} & r_2(t) &= \varrho(t) \sin \varphi(t) \\ h(t) &= r_3(t) & r_3(t) &= h(t) \end{aligned} \quad \Longleftrightarrow$$

Entsprechend folgt jetzt

$$\begin{aligned} \tilde{r}_1 &= \varrho \cdot \cos(\varphi + \alpha) = \varrho \cos \varphi \cos \alpha - \varrho \sin \varphi \sin \alpha = r_1 \cos \alpha - r_2 \sin \alpha \\ \tilde{r}_2 &= \varrho \cdot \sin(\varphi + \alpha) = \varrho \sin \varphi \cos \alpha + \varrho \cos \varphi \sin \alpha = r_1 \sin \alpha + r_2 \cos \alpha \\ \frac{\tilde{r}_2}{\tilde{r}_1} &= \tan(\varphi + \alpha) \end{aligned}$$

Außerdem gilt:

$$\begin{aligned} -V_0 \arctan\left(\frac{r_2}{r_1}\right) + Dr_3 &= -V_0 \cdot \varphi + Dr_3 \\ &= -V_0(\varphi + \alpha) + D(r_3 + \frac{V_0}{D}\alpha) \\ &= -V_0 \arctan\left(\frac{\tilde{r}_2}{\tilde{r}_1}\right) + D \cdot \tilde{r}_3 \end{aligned}$$

Damit ist gezeigt: das Potential ist invariant unter der angegebenen Transformation  $\mathbf{r} \mapsto \tilde{\mathbf{r}}$  (Spiraltransformation).

Die initiale Frage ist damit aber noch nicht geklärt: Welche Größe ist Erhaltungsgröße in diesem System? Dafür ist es notwendig, eine infinitesimale Verrückung des Systems zu betrachten. Für einen infinitesimalen Winkel  $\alpha = \varepsilon$  ergibt sich aus der Taylorentwicklung

$$\left. \begin{aligned} \tilde{r}_1 &= r_1 - \varepsilon r_2 \stackrel{!}{=} r_1 + \varepsilon \cdot \eta_1 \\ \tilde{r}_2 &= r_2 + \varepsilon r_1 \stackrel{!}{=} r_2 + \varepsilon \cdot \eta_2 \\ \tilde{r}_3 &= r_3 + s\varepsilon \stackrel{!}{=} r_3 + \varepsilon \eta_3 \end{aligned} \right\}, \text{ d.h. es ist } \Rightarrow \begin{aligned} \eta_1 &= -r_2 \\ \eta_2 &= r_1 \\ \eta_3 &= s \end{aligned}$$

Mit der zusätzlichen Wahl

$$\tau = 0$$

$$\Lambda = 0$$

erhält man jetzt die Noether Invariante des Systems zu

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} I = \frac{d}{dt} [m\dot{r}_1\eta_1 + m\dot{r}_2\eta_2 + m\dot{r}_3\eta_3] = m \frac{d}{dt} [\dot{r}_1(-r_2) + \dot{r}_2 \cdot r_1 + \dot{r}_3 s] \\ &= \frac{d}{dt} \left[ \underbrace{r_1 m \dot{r}_2 - r_2 m \dot{r}_1}_{\ell_3} + s m \dot{r}_3 \right] \\ &= \frac{d}{dt} [\ell_3 + s \cdot p_3] \end{aligned}$$

Die Lagrangefunktion dieses Beispiels besitzt demnach die Symmetrieeigenschaft, dass eine bestimmte *Linearkombination aus Drehimpuls und Impuls* des Teilchens Erhaltungsgröße ist:

$$\begin{aligned} \ell_3 + s \cdot p_3 &= \text{const.} \\ s &= \frac{V_0}{D} \end{aligned}$$

### 6.5.5 Wronskideterminante

Wir betrachten die Lagrangefunktion des harmonischen Oszillators

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{D}{2} x^2 = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2)$$

Wir betrachten eine spezielle Variation  $\tilde{x} = x + \varepsilon \eta$  in Gestalt einer zeitlichen Oszillation

$$\begin{aligned} \eta &= \sin(\omega t) \\ \tau &= 0 \end{aligned}$$

Im Gegensatz zu den vorhergegangenen Beispielen wird hier nicht mehr  $\Lambda = 0$  gesetzt. Aus dem Noetherschen Satz folgt dann:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{L}}d\tilde{t} - \mathcal{L}dt &= \frac{m}{2} \left( [(\dot{x}^2 + \varepsilon\dot{\eta})^2 - \dot{x}^2] - \omega^2 [(x + \varepsilon\eta)^2 - x^2] \right) dt \\ &= \varepsilon m \left( \omega\dot{x}(t) \cos(\omega t) - \omega^2 x(t) \sin(\omega t) \right) dt + o(\varepsilon^2) \\ &\stackrel{!}{=} d\Lambda\end{aligned}$$

Daher ist

$$\frac{d\Lambda}{dt} = m\omega\dot{x} \cos(\omega t) - m\omega^2 x \sin(\omega t)$$

und

$$\Lambda(x, t) = m\omega x(t) \cos(\omega t)$$

Es folgt jetzt

$$0 = \frac{dI}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \eta - \Lambda \right)$$

Somit ist

$$\begin{aligned}I &= m\dot{x}(t) \sin(\omega t) - m\omega x(t) \cos(\omega t) = m \det \begin{bmatrix} x(t) & -\sin(\omega t) \\ \dot{x}(t) & -\omega \cos(\omega t) \end{bmatrix} \\ &= \text{const.} \quad \forall t\end{aligned}$$

Es handelt sich bei dieser Erhaltungsgröße um die sog. *Wronski-Determinante*<sup>6</sup>.

### 6.5.6 Galilei-Transformation

Wir betrachten zwei wechselwirkende Teilchen  $a$  und  $b$ . Die Lagrangefunktion des Systems sei

$$\mathcal{L} = \frac{m_a}{2} \langle \dot{\mathbf{r}}_a, \dot{\mathbf{r}}_a \rangle + \frac{m_b}{2} \langle \dot{\mathbf{r}}_b, \dot{\mathbf{r}}_b \rangle - V(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|)$$

wobei  $V(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|)$  die vom Abstand  $|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|$  der Teilchen abhängige potentielle Energie ist. Wir machen jetzt eine Galilei-Transformation mit fest gewählter (beliebiger) Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$ , so dass für die neuen Koordinaten

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{r}}_a &= \mathbf{r}_a + \varepsilon \mathbf{v} t \\ \tilde{\mathbf{r}}_b &= \mathbf{r}_b + \varepsilon \mathbf{v} t \\ \tilde{t} &= t\end{aligned}$$

gilt. Damit ist  $\tau = 0$  und  $\boldsymbol{\eta}_a = \mathbf{v} t = \boldsymbol{\eta}_b$ . Die neuen Geschwindigkeiten, d.h. die zeitlichen Ableitungen der neuen Koordinaten, sind daher

$$\begin{aligned}\dot{\tilde{\mathbf{r}}}_a &= \dot{\mathbf{r}}_a + \varepsilon \mathbf{v} \\ \dot{\tilde{\mathbf{r}}}_b &= \dot{\mathbf{r}}_b + \varepsilon \mathbf{v}.\end{aligned}$$

Eingesetzt in die Forderung des Noethertheorems erhält man

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{L}}d\tilde{t} - \mathcal{L}dt &= \varepsilon \langle \mathbf{v}, m_a \dot{\mathbf{r}}_a + m_b \dot{\mathbf{r}}_b \rangle dt \\ &= \varepsilon d\Lambda + o(\varepsilon^2).\end{aligned}$$

<sup>6</sup>Für weitere Informationen zu den Eigenschaften der Wronski-Determinante empfiehlt sich das Buch [Fischer und Kaul \(2004\)](#)

Offensichtlich steht im Skalarprodukt das Produkt aus Gesamtmasse  $M = m_a + m_b$  und Schwerpunkt  $\mathbf{R}(t) = \frac{m_a \mathbf{r}_a(t) + m_b \mathbf{r}_b(t)}{m_a + m_b}$ , der Teilchen, so dass sich die Funktion  $\Lambda$  folgendermaßen angeben lässt:

$$\Lambda = \langle \mathbf{v}, m_a \dot{\mathbf{r}}_a + m_b \dot{\mathbf{r}}_b \rangle = \langle \mathbf{v}, M \dot{\mathbf{R}} \rangle = \langle M \mathbf{v}, \dot{\mathbf{R}} \rangle$$

Aus dem Noether-Theorem ergibt sich sofort die Erhaltungsgröße:

$$\begin{aligned} I(t) &= \langle m_a \dot{\mathbf{r}}_a, \mathbf{v}t \rangle + \langle m_b \dot{\mathbf{r}}_b, \mathbf{v}t \rangle - \langle M \mathbf{v}, \dot{\mathbf{R}}(t) \rangle \\ &= \langle m_a \dot{\mathbf{r}}_a + m_b \dot{\mathbf{r}}_b, \mathbf{v}t \rangle - \langle M \mathbf{v}, \dot{\mathbf{R}}(t) \rangle \\ &= \langle M \dot{\mathbf{R}}, \mathbf{v}t \rangle - \langle M \mathbf{v}, \dot{\mathbf{R}}(t) \rangle \\ &= \langle M t \dot{\mathbf{R}}(t), \mathbf{v} \rangle - \langle M \mathbf{v}, \dot{\mathbf{R}}(t) \rangle \\ &= \langle M [t \dot{\mathbf{R}}(t) - \dot{\mathbf{R}}(t)], \mathbf{v} \rangle \\ &= -\langle M \dot{\mathbf{R}}(0), \mathbf{v} \rangle \\ &= I(0) \end{aligned}$$

Dies gilt für beliebige, fest gewählte Relativgeschwindigkeiten  $\mathbf{v}$ , also

$$\mathbf{R}(t) = t \dot{\mathbf{R}}(0) + \mathbf{R}(0)$$

Dann ergibt sich hieraus sofort

$$\begin{aligned} \frac{\dot{R}_\alpha(t)}{R_\alpha(t) - R_\alpha(0)} &= \frac{1}{t} \\ \frac{d}{dt} \ln [R_\alpha(t) - R_\alpha(0)] &= \frac{d}{dt} \ln t \\ \frac{d}{dt} \ln \left[ \frac{R_\alpha(t) - R_\alpha(0)}{t} \right] &= 0 \\ \frac{R_\alpha(t) - R_\alpha(0)}{t} &= V_\alpha \end{aligned}$$

Die Integrationskonstante mit der physikalischen Dimension einer Geschwindigkeit nennen wir  $V_\alpha$ . Der Schwerpunkt der beiden Teilchen bewegt sich demnach gleichförmig mit konstanter Geschwindigkeit  $\mathbf{V}$  fort:

$$\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}(0) + \mathbf{V}t$$

Man beachte, dass *nicht* gesagt wurde, dass  $\mathbf{V} = \mathbf{v}$  gelten soll!

Während Newton die gleichförmige Schwerpunktsbewegung als Axiom forderte, erhält man sie aus dem Noetherschen Theorem als Folge einer Symmetrie des Systems!

### Dilatationstransformation

Sei die Lagrangefunktion des zu betrachtenden Systems von der speziellen Form

$$\mathcal{L}(x, \dot{x}) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 + \frac{k}{x^2}$$

Wir machen jetzt eine Dilatationstransformation mit einem beliebigen, aber fest gewählten Streckfaktor  $\lambda > 0$ :

$$\begin{aligned} \tilde{x}(t) &= \frac{1}{\sqrt{\lambda}} x(t) \\ \tilde{t} &= \frac{1}{\lambda} t \end{aligned}$$



Dann gilt

$$\frac{d\tilde{x}}{d\tilde{t}} = \frac{\left(\frac{dx}{\sqrt{\lambda}}\right)}{\left(\frac{dt}{\lambda}\right)} = \sqrt{\lambda} \frac{dx}{dt}.$$

Betrachtet man nun die kinetische Energie  $K$  und das Potential  $V$ , so findet man, dass beide *invariant* unter der Dilatationstransformation sind:

$$\begin{aligned}\tilde{K} d\tilde{t} &= \frac{m}{2} \left(\frac{d\tilde{x}}{d\tilde{t}}\right)^2 d\tilde{t} = \frac{m}{2} \lambda \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 \frac{1}{\lambda} dt = \frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 dt = K dt \\ \tilde{V} d\tilde{t} &= \frac{k}{\tilde{x}^2} d\tilde{t} = \frac{k}{x^2} \lambda \frac{1}{\lambda} dt = \frac{k}{x^2} dt = V dt\end{aligned}$$

Demnach ist

$$\tilde{L} d\tilde{t} - L dt = 0$$

Dass es keine Änderung der Lagrangefunktion durch die Dilatation von Zeit und Raum gibt, ist auch eine Symmetrie des Systems.

Wie sieht die Noetherinvariante unter der Dilatationstransformation aus? Dafür betrachten wir eine infinitesimale Streckung  $\lambda = 1 + \varepsilon$ . Für diese ergibt sich mit einer Taylorentwicklung nach  $\varepsilon$ :

$$\begin{aligned}\tilde{x}(t) &= \frac{x(t)}{\sqrt{1+\varepsilon}} = \left(1 - \frac{\varepsilon}{2}\right) x(t) + o(\varepsilon^2) = x(t) - \frac{\varepsilon}{2} x(t) + o(\varepsilon^2) \\ \tilde{t} &= \frac{t}{1+\varepsilon} = (1 - \varepsilon)t + o(\varepsilon^2) = t - \varepsilon t + o(\varepsilon^2)\end{aligned}$$

Durch Vergleich mit

$$\begin{aligned}\tilde{x} &= x + \varepsilon \eta \\ \tilde{t} &= t + \varepsilon \tau\end{aligned}$$

können wir für  $\varepsilon \ll 1$  dann die entsprechenden Ausdrücke für  $\eta$  und  $\tau$  ablesen:

$$\begin{aligned}\eta &= -\frac{1}{2}x \\ \tau &= -t\end{aligned}$$

Damit folgt die Noetherinvariante des Systems zu:

$$I = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \eta + \underbrace{\left(L - \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \dot{x}\right)}_{\equiv -E} \tau = -\left(\frac{m}{2} \dot{x} x + E \cdot t\right) = \text{const.} \quad \forall t$$

Diese Beispiele decken bei Weitem nicht die Aussagekraft des Noetherschen Theorems ab. Das Noether-Theorem ist ein mächtiges, konstruktives Prinzip zum Aufspüren (auch versteckter) Invarianten von physikalischen Systemen, das bis hinein in die Quantenfeldtheorie zur Anwendung kommt.

## Kapitel 7

# Theorie der kleinen Schwingungen

### 7.1 Einleitung

Ein ganz einfaches Beispiel für ein schwingendes System ist ein Massenpunkt  $m$ , der an einer Feder mit Federkonstante  $D$  befestigt ist, und in vertikaler Richtung im Schwerfeld der Erde unter gleichzeitiger Dehnung der Feder ausgelenkt wird. Mit zunehmender Dehnung der Feder baut sich eine rücktreibende Kraft auf, die das System schließlich zurück ins Gleichgewicht treibt. Mit der Auslenkung um die Gleichgewichtslage verbunden ist ein Plus an potentieller Energie. Aufgrund der Erhaltung der Energie bildet sich dabei ein stationärer Schwingungszustand aus, bei dem sich Phasen maximaler potentieller Energie mit Phasen maximaler kinetischer Energie des Massenpunktes periodisch abwechseln.

Auch die Schwingungszustände sehr viel komplexerer Vielteilchensystems können bei Beschränkung auf kleine Auslenkungen um die Gleichgewichtslage durch ein Modell gekoppelter harmonischer Oszillatoren beschrieben werden. So lassen sich die Schwingungen der Atome z.B. eines Natriumchlorid-Kristalls um Ihre Ruhelagen auf das Wirken von elastischen Federkräften zwischen Nachbaratomen zurückführen.

### 7.2 Virialsatz

Um ein Maß für die mittlere kinetische Energie zu gewinnen, betrachten wir das sog. *Virial*:

$$G(t) = \sum_k p_k(t)q_k(t)$$

Die Ableitung des Virials nach der Zeit liefert unter Berücksichtigung der Hamilton'schen Bewegungsgleichungen:

$$\begin{aligned} \frac{dG(t)}{dt} &= \sum_k [\dot{p}_k q_k + p_k \dot{q}_k] \\ &= \sum_k \left[ -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_k} q_k + p_k \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k} \right] \end{aligned}$$

Wir definieren den zeitlichen Mittelwert einer Funktion  $A(t)$  zu

$$\begin{aligned}\langle A(t) \rangle_T &= \frac{1}{T} \int_0^T dt A(t) \\ \langle A(t) \rangle &= \lim_{T \rightarrow \infty} \langle A(t) \rangle_T\end{aligned}$$

Es folgt die exakte Relation

$$\left\langle \frac{dG}{dt} \right\rangle_T = \sum_k \left\langle p_k \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k} \right\rangle_T - \sum_k \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_k} q_k \right\rangle_T$$

Für ein *gebundenes* Vielteilchensystem ist das Virial beschränkt:

$$G_{\min} \leq G(t) \leq G_{\max}$$

Dies impliziert sofort:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \left| \left\langle \frac{dG}{dt} \right\rangle_T \right| = \lim_{T \rightarrow \infty} \left| \frac{G(T) - G(0)}{T} \right| \leq \lim_{T \rightarrow \infty} \left| \frac{G_{\max} - G_{\min}}{T} \right| = 0$$

Damit folgt der sog. Virialsatz:

$$\sum_k \left\langle p_k \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k} \right\rangle = \sum_k \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_k} q_k \right\rangle \quad (7.1)$$

Wir verwenden jetzt kartesische Koordinaten und betrachten ein *konservatives* System mit einer Anzahl  $N$  wechselwirkender Teilchen, z.B. in  $D = 3$  räumlichen Dimensionen:

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= K + V \\ K &= \sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=1}^D \frac{p_{j,\alpha}^2}{2m_j} \\ V &= V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)\end{aligned}$$

Es folgt

$$\begin{aligned}\sum_k \left\langle p_k \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k} \right\rangle &= \sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=1}^D \left\langle p_{j,\alpha} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_{j,\alpha}} \right\rangle = \langle 2K \rangle \\ \sum_k \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_k} q_k \right\rangle &= \sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=1}^D \left\langle \frac{\partial V}{\partial r_{j,\alpha}} r_{j,\alpha} \right\rangle\end{aligned}$$

Damit folgt die Aussage:

$$2 \langle K \rangle = \sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=1}^D \left\langle \frac{\partial V}{\partial r_{j,\alpha}} r_{j,\alpha} \right\rangle$$

Falls die auf die Teilchen des Systems wirkenden Kräfte auf einer Wechselwirkung zwischen je zwei Teilchen beruhen, so gilt:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\substack{l,l'=1 \\ l \neq l'}}^N v(|\mathbf{r}^{(l)} - \mathbf{r}^{(l')}|)$$

Dann zeigt eine einfache Rechnung:

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=1}^D \left\langle \frac{\partial V}{\partial r_{j,\alpha}} r_{j,\alpha} \right\rangle &= -\frac{1}{2} \sum_{j,\alpha} \sum_{l \neq l'} \frac{\partial v(|\mathbf{r}^{(l)} - \mathbf{r}^{(l')}|)}{\partial r_{\alpha}^{(j)}} r_{\alpha}^{(j)} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{l \neq l'} \left[ \frac{\partial v(r)}{\partial r} \right]_{r=|\mathbf{r}^{(l)} - \mathbf{r}^{(l')}|} \sum_{j,\alpha} \frac{\partial |\mathbf{r}^{(l)} - \mathbf{r}^{(l')}|}{\partial r_{\alpha}^{(j)}} r_{\alpha}^{(j)} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{l \neq l'} \left[ \frac{\partial v(r)}{\partial r} \right]_{r=|\mathbf{r}^{(l)} - \mathbf{r}^{(l')}|} \sum_{\substack{j \\ \alpha,\gamma}} \frac{(r_{\gamma}^{(l)} - r_{\gamma}^{(l')})(\delta_{l,j}\delta_{\gamma,\alpha} - \delta_{l',j}\delta_{\gamma,\alpha})}{|\mathbf{r}^{(l)} - \mathbf{r}^{(l')}|} r_{\alpha}^{(j)} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{l \neq l'} \left[ \frac{\partial v(r)}{\partial r} \right]_{r=|\mathbf{r}^{(l)} - \mathbf{r}^{(l')}|} \sum_{\gamma} \frac{(r_{\gamma}^{(l)} - r_{\gamma}^{(l')})^2}{|\mathbf{r}^{(l)} - \mathbf{r}^{(l')}|} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{l \neq l'} \left[ r \cdot \frac{\partial v(r)}{\partial r} \right]_{r=|\mathbf{r}^{(l)} - \mathbf{r}^{(l')}|}
\end{aligned}$$

Für spezielle Zweiteilchen-Potentiale, die mit einer Potenz  $n$  des Abstands  $r$  variieren,

$$v(r) = cr^n,$$

folgt unmittelbar:

$$r \frac{\partial v(r)}{\partial r} = n v(r)$$

Der Fall  $n = 2$  beschreibt eine zur Auslenkung proportionale Rückstellkraft, d.h. den harmonischen Oszillator. Der Fall  $n = -1$  entspricht dem Newton'schen Gravitationsgesetz.

Es folgt nach dem Gesagten für diese Klasse von Zweiteilchen-Wechselwirkungen:

$$\sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=1}^D \left\langle \frac{\partial V}{\partial r_{j,\alpha}} r_{j,\alpha} \right\rangle = -n \langle V \rangle$$

Die mittlere kinetische Energie der Teilchen des Systems ist in dem Fall durch die mittlere potentielle Energie festgelegt:

$$\langle K \rangle = \frac{n}{2} \langle V \rangle$$

Wegen des Energiesatzes

$$E = \langle V \rangle + \langle K \rangle$$

folgt hieraus sofort die Beziehung:

$$\begin{aligned}
\langle K \rangle &= \frac{n}{n+2} E \\
\langle V \rangle &= \frac{2}{n+2} E
\end{aligned}$$

Für das Kepler-Problem ( $n = -1$ ) bedeutet das:

$$\begin{aligned}
\langle K \rangle &= -E > 0 \\
\langle V \rangle &= 2E < 0
\end{aligned}$$

Für den harmonischen Oszillator ( $n = 2$ ) folgt dagegen:

$$\begin{aligned}\langle K \rangle &= \frac{E}{2} \\ \langle V \rangle &= \frac{E}{2}\end{aligned}$$

Der Virialsatz wird in der Astronomie, Thermodynamik und auch in der Atomphysik angewendet.

### 7.3 Kleine Schwingungen

Im Folgenden sollen Systeme behandelt werden, deren Lagrangefunktion

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}) = K - V$$

nicht explizit zeitabhängig ist, d.h. es gilt Energieerhaltung. Die potentielle Energie der hier betrachteten Systeme  $V = V[q_1(t), q_2(t), \dots, q_n(t)]$  soll insbesondere die Eigenschaft besitzen, dass eine stabile Gleichgewichtslage  $q_1^{(0)}, q_2^{(0)}, \dots, q_M^{(0)}$  für die Teilchen des Systems existiert. Dann ergibt sich für kleine Auslenkungen  $\eta_j(t) = q_j(t) - q_j^{(0)}$  um die Gleichgewichtslage eine Taylorreihenentwicklung der potentiellen Energie bis einschließlich der Terme zweiter Ordnung:

$$\begin{aligned}V[q_1(t), q_2(t), \dots, q_M(t)] &= V[q_1^{(0)} + \eta_1(t), q_2^{(0)} + \eta_2(t), \dots, q_M^{(0)} + \eta_M(t)] \\ &\left\{ \begin{aligned} &= V(q_1^{(0)}, q_2^{(0)}, \dots, q_M^{(0)}) + \sum_{j=1}^M \underbrace{\left[ \frac{\partial V}{\partial q_j} \right]_{q_j=q_j^{(0)}}}_{\equiv 0} \eta_j(t) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^M \left[ \frac{\partial^2 V}{\partial q_k \partial q_l} \right]_{q=q^{(0)}} \eta_k(t) \eta_l(t) + o(\|\eta\|^3) \end{aligned} \right.\end{aligned}$$

Da nach Voraussetzung die Auslenkung der Massenpunkte um die Gleichgewichtsposition erfolgt, ist notwendig die erste Ableitung identisch Null:  $\left[ \frac{\partial V}{\partial q_j} \right]_{q_j=q_j^{(0)}} = 0$ . Damit gilt in der

Umgebung der Gleichgewichtspositionen  $q_1^{(0)}, q_2^{(0)}, \dots, q_M^{(0)}$  im Rahmen der harmonischen Approximation:

$$\begin{aligned}V[q_1(t), q_2(t), \dots, q_M(t)] &= V^{(0)} + \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^M \mathbb{D}_{k,l} \eta_k(t) \eta_l(t) \quad (7.2) \\ \mathbb{D}_{k,l} &= \left[ \frac{\partial^2 V}{\partial q_k \partial q_l} \right]_{q=q^{(0)}}\end{aligned}$$

Wegen der Vertauschbarkeit der zweiten Ableitungen gilt  $\mathbb{D}_{k,l} = \mathbb{D}_{l,k}$ , d.h. die Matrix der sog. Kraftkonstanten ist symmetrisch:  $\mathbb{D} = \mathbb{D}^T$ . Der Term  $V^{(0)} = V(q_1^{(0)}, q_2^{(0)}, \dots, q_n^{(0)})$  stellt nur eine energetische Konstante dar und trägt daher nicht zur Dynamik bei. Aus diesem Grunde wird  $V^{(0)}$  im Folgenden ignoriert.

Nach der potentiellen Energie  $V$  soll nun die kinetische Energie  $K$  näher betrachtet werden. Falls die Lagekoordinaten  $q_k(t) = q_k^{(0)} + \eta_k(t)$  über eine Punkttransformation aus den entsprechenden kartesischen Koordinaten hervorgehen, so besteht zwischen dem kartesischen Ortsvektor des  $j$ -

ten Teilchens und den verallgemeinerten Lagekoordinaten  $q_k(t)$  der Zusammenhang  $r_{j,\alpha}(t) = r_{j,\alpha}[q(t)]$ , und folglich:

$$\dot{r}_{j,\alpha}(t) = \frac{d}{dt}r_{j,\alpha}[q(t)] = \sum_{l=1}^M \frac{\partial r_{j,\alpha}(q)}{\partial q_l} \cdot \dot{q}_l(t)$$

Entsprechend lässt sich die kinetische Energie ( $\alpha \in \{1, 2, 3\}$ ) entwickeln:

$$\begin{aligned} K &= \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{2} \sum_{\alpha=1}^3 \dot{r}_{j\alpha} \dot{r}_{j\alpha} = \frac{1}{2} \sum_{\ell,k=1}^M \dot{q}_\ell \dot{q}_k \sum_{j=1}^N m_j \frac{\partial r_{j,\alpha}[q(t)]}{\partial q_\ell} \frac{\partial r_{j,\alpha}[q(t)]}{\partial q_k} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\ell,k=1}^M \dot{\eta}_\ell \dot{\eta}_k \underbrace{\sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 m_j \left[ \frac{\partial r_{j,\alpha}[q(t)]}{\partial q_\ell} \frac{\partial r_{j,\alpha}[q(t)]}{\partial q_k} \right]_{q(t)=q^{(0)}}}_{=\mathbb{M}_{\ell k}} + o(\|\dot{\eta}^2 \eta\|) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\ell,k=1}^M \dot{\eta}_\ell(t) \dot{\eta}_k(t) \mathbb{M}_{\ell k} + o(\|\dot{\eta}^2 \eta\|) \end{aligned}$$

Man kann den Konstanten  $\mathbb{M}_{\ell k} = \mathbb{M}_{k\ell}$  eine symmetrische und reelle Massematrix  $\mathbb{M}$  zuordnen:  $\mathbb{M} = \mathbb{M}^T$ . Zusätzlich ist  $\mathbb{M}$  positiv definit, das heißt alle Eigenwerte von  $\mathbb{M}$  sind positiv. Die Lagrange-Funktion des schwingenden Systems ergibt sich im Rahmen der Gültigkeit der Harmonischen Approximation für kleine Auslenkungen  $\eta_k(t)$  um die Ruhelage  $q_k^{(0)}$  zu:

$$\mathcal{L} = K - V = \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^M \dot{\eta}_k(t) \mathbb{M}_{k,l} \dot{\eta}_l(t) - \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^M \eta_k(t) \mathbb{D}_{k,l} \eta_l(t)$$

Aufstellen der Lagrange'schen Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\eta}_k} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_k} = 0$$

liefert ein lineares System von  $M$  gekoppelten linearen Differentialgleichungen zweiter Ordnung:

$$\mathbb{M} \ddot{\eta}(t) + \mathbb{D} \eta(t) = \mathbf{0}$$

Aufgrund unserer Annahme, dass  $\mathbb{M}$  symmetrisch, reell und vor allem *positiv definit* ist, existiert die Zerlegung<sup>1</sup>

$$\begin{aligned} \mathbb{M}^{\frac{1}{2}} \mathbb{M}^{\frac{1}{2}} &= \mathbb{M} \\ \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbb{M}^{\frac{1}{2}} &= \mathbf{1} \end{aligned}$$

<sup>1</sup>Für den Spezialfall  $\mathbb{M} = \text{diag}\{m_1, m_2, \dots, m_N\}$  bzw.

$$\mathbb{M} = \begin{pmatrix} m_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & m_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & m_N \end{pmatrix}$$

ergibt sich  $\mathbb{M}^{1/2} = \text{diag}\{\pm m_1^{1/2}, \pm m_2^{1/2}, \dots, \pm m_n^{1/2}\}$ , das heißt es existieren  $2^N$  Lösungen der Gleichung

$$\mathbb{M}^{1/2} \cdot \mathbb{M}^{1/2} = \mathbb{M}.$$

Zusätzlich gilt für passend gewählte Matrizen

$$\mathbb{M}^{1/2} \cdot \mathbb{M}^{-1/2} = \mathbf{1}$$

Somit lässt sich die Bewegungsgleichung für den Vektor  $\eta$  der Auslenkungen folgendermaßen schreiben:

$$\mathbb{M}^{\frac{1}{2}} \mathbb{M}^{\frac{1}{2}} \ddot{\eta}(t) + \mathbb{D} \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbb{M}^{\frac{1}{2}} \eta(t) = \mathbf{0}$$

Nach Multiplikation von links mit  $\mathbb{M}^{-1/2}$  ergibt sich:

$$\mathbb{M}^{\frac{1}{2}} \ddot{\eta}(t) + \underbrace{\mathbb{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbb{D} \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}}}_{\equiv \Phi} \mathbb{M}^{\frac{1}{2}} \eta(t) = \mathbf{0}$$

Die Matrix  $\Phi = \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbb{D} \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}}$  nennt man „dynamische Matrix“. Betrachte die Linearkombination von Auslenkungen

$$\xi(t) = \mathbb{M}^{\frac{1}{2}} \eta(t) \quad (7.3)$$

$$\xi_k(t) = \sum_{l=1}^M \left[ \mathbb{M}^{\frac{1}{2}} \right]_{k,l} \eta_l(t)$$

Es folgt, dass die *ursprünglichen* gekoppelten Bewegungsgleichungen für den Vektor der Auslenkungen  $\eta(t)$  nun in entsprechende Bewegungsgleichungen für die Linearkombinationen  $\xi_k(t)$  übergehen:

$$\ddot{\xi}(t) + \Phi \xi(t) = 0$$

Die dynamische Matrix  $\Phi$  ist in der Tat reell und symmetrisch:  $\Phi^T = \Phi$ . Dann gibt es eine Diagonalmatrix

$$\omega^2 = \text{diag}\{\omega_1^2, \omega_2^2, \dots, \omega_N^2\}$$

von Eigenwerten und eine orthogonale Transformation  $\mathbb{S}$  mit den Eigenvektoren von  $\Phi$  als Spaltenvektoren, so dass gilt

$$\begin{aligned} \Phi &= \mathbb{S} \omega^2 \mathbb{S}^T \\ \mathbb{S} \mathbb{S}^T &= \mathbf{1} = \mathbb{S}^T \mathbb{S} \\ \mathbb{S}^T \Phi \mathbb{S} &= \omega^2 \\ \Phi \mathbb{S} &= \mathbb{S} \omega^2 \end{aligned} \quad (7.4)$$

Mit (7.3) und (7.4) folgt nun

$$\mathbb{S}^T \ddot{\xi} + \omega^2 \mathbb{S}^T \xi = 0$$

Schließlich definieren wir sog. *Normalkoordinaten*:

$$\begin{aligned} \zeta(t) &= \mathbb{S}^T \xi(t) = \mathbb{S}^T \mathbb{M}^{\frac{1}{2}} \eta(t) \\ \zeta_k(t) &= \sum_l \left[ \mathbb{S}^T \mathbb{M}^{\frac{1}{2}} \right]_{kl} \eta_l(t) \end{aligned} \quad (7.5)$$

Wir erhalten dann als Bewegungsgleichungen eine Anzahl  $M$  von *entkoppelten* harmonischen Oszillatoren:

$$\ddot{\zeta}_k(t) + \omega_k^2 \zeta_k(t) = 0$$

Hier ist  $\omega_k^2$  der  $k$ -te Eigenwert der dynamischen Matrix  $\Phi$ .

Es sind drei Fälle zu unterscheiden:

1.  $\omega_k^2 > 0$  :

$$\zeta_k(t) = \frac{1}{2} [\zeta_{k,0} e^{-i\omega_k t} + \zeta_{k,0}^* e^{i\omega_k t}] = \Re [\zeta_{k,0} e^{i\omega_k t}]$$

Dies sind die üblichen harmonischen Schwingungen mit (komplexer) Amplitude  $\zeta_{k,0} = |\zeta_{k,0}| e^{i\delta_{k,0}}$ .

2.  $\omega_k^2 = 0$  :

$$\zeta_k(t) = \zeta_{k,0} + u_k \cdot t$$

Dieser Fall beschreibt eine Translation der entsprechenden Freiheitsgrade des Systems mit konstanter Geschwindigkeit  $u_k$ .

3.  $\omega_k^2 < 0$  :

$$\zeta_k(t) = \zeta_{k,+} e^{|\omega_k| \cdot t} + \zeta_{k,-} e^{-|\omega_k| t}$$

Dies sind die instabilen Lösungen im Rahmen des Gültigkeitsbereichs der harmonischen Approximation! Ob das System tatsächlich instabil ist, kann allerdings erst entschieden werden, wenn man über die harmonische Näherung hinausgeht!

Die gesuchten Auslenkungen  $\eta_k(t)$  der Teilchen des Systems aus ihrer Ruhelage können somit als Linearkombination der Normalkoordinaten  $\zeta_l(t)$  dargestellt werden:

$$\begin{aligned} \eta(t) &= \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbb{S} \zeta(t) \\ \eta_k(t) &= \sum_{l=1}^M \left[ \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbb{S} \right]_{k,l} \zeta_l(t) \end{aligned}$$

Abschließend soll noch die Lagrangefunktion  $\mathcal{L}$  in Normalkoordinaten dargestellt werden:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= K - V \\ &= \frac{1}{2} \dot{\eta}^T \mathbb{M} \dot{\eta} - \frac{1}{2} \eta^T \mathbb{D} \eta \\ &= \frac{1}{2} \left[ \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbb{S} \dot{\zeta} \right]^T \mathbb{M} \left[ \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbb{S} \dot{\zeta} \right] - \frac{1}{2} \left[ \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbb{S} \zeta \right]^T \mathbb{D} \left[ \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbb{S} \zeta \right] \\ &= \frac{1}{2} \zeta^T \mathbb{S}^T \underbrace{\mathbb{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbb{M} \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}}}_{\equiv \mathbb{1}} \mathbb{S} \dot{\zeta} - \frac{1}{2} \zeta^T \mathbb{S}^T \underbrace{\mathbb{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbb{D} \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}}}_{\equiv \Phi} \mathbb{S} \zeta \\ &= \frac{1}{2} \zeta^T \underbrace{\mathbb{S}^T \mathbb{S}}_{\equiv \mathbb{1}} \dot{\zeta} - \frac{1}{2} \zeta^T \underbrace{\mathbb{S}^T \Phi \mathbb{S}}_{\equiv \omega^2} \zeta \\ &= \frac{1}{2} \left( \dot{\zeta}^T \dot{\zeta} - \zeta^T \omega^2 \zeta \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^M \left( \dot{\zeta}_k^2 - \omega_k^2 \zeta_k^2 \right) \end{aligned}$$

Die Vielteilchen-Lagrangefunktion ist im Rahmen der harmonischen Approximation somit die Summe der entsprechenden entkoppelten Einteilchen-Lagrangefunktionen.

## 7.4 Einfluss äußerer Kräfte

Die bisherige Betrachtung beschränkte sich auf Systeme, die keinen äußeren Kräften ausgesetzt sind. Wir betrachten jetzt ein durch äußere Kräfte  $F_k(t)$  angetriebenes System gekoppelter Oszillatoren. Man erhält als Bewegungsgleichung

$$\mathbb{M} \ddot{\eta}(t) + \mathbb{D} \eta(t) = \mathbb{F}(t) \quad (7.6)$$



Hier ist

$$\mathbb{F}(t) = \begin{pmatrix} F_1(t) \\ \vdots \\ F_M(t) \end{pmatrix}$$

der aus den äußeren Kräften gebildete Spaltenvektor. Wir transformieren nun auf Normalkoordinaten,

$$\eta(t) = \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbb{S} \zeta(t),$$

und erhalten durch Einsetzen in die obige Bewegungsgleichung:

$$\mathbb{M} \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbb{S} \ddot{\zeta}(t) + \mathbb{D} \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbb{S} \zeta(t) = \mathbb{F}(t)$$

Nach Multiplikation mit  $\mathbb{S}^T \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}}$  erhält man die Darstellung des Systems in Normalkoordinaten:

$$\ddot{\zeta}(t) + \underbrace{\mathbb{S}^T \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbb{D} \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbb{S}}_{\equiv \omega^2} \zeta(t) = \mathbb{S}^T \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbb{F}(t)$$

Dies ist tatsächlich ein System von  $M$  *entkoppelten* getriebenen harmonischen Oszillatoren:

$$\ddot{\zeta}_i(t) + \omega_i^2 \zeta_i(t) = f_i(t)$$

Die treibende Kraft  $f_i(t)$  ist aufgrund der vorangestellten Betrachtung aber eine bestimmte Linearkombination der ursprünglichen treibenden Kräfte  $F_k(t)$ :

$$f_i(t) = \sum_k \left[ \mathbb{S}^T \mathbb{M}^{-\frac{1}{2}} \right]_{i,k} F_k(t)$$

## 7.5 Beispiel - Streckschwingungen eines linearen Moleküls

Wir betrachten als Beispiel das Modell eines „dreiatomigen“ Moleküls<sup>2</sup>, dessen Atome linear angeordnet sind. Die Bindung zwischen den Atomen soll durch harmonische Federn angenähert werden. Die Massen  $m$  der beiden äußeren Atome sollen dabei gleich sein, aber verschieden von der Masse  $M$  des Atomes in der Mitte ( $m \neq M$ ). Die Bindungen, d.h. die Federkonstanten, zwischen den beiden äußeren Atomen und dem mittleren sollen gleich sein. Damit erhält man für eine Auslenkung  $\eta_i$  um die Ruhelage  $q_i^{(0)}$  des  $i$ -ten Atoms die kinetische und die potentielle Energie zu:

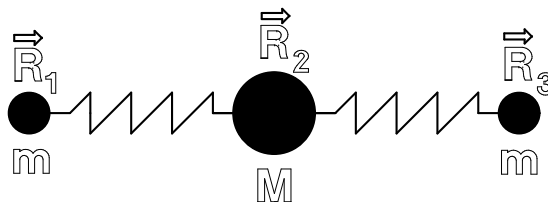


Abbildung 7.1: Lineares Molekül

<sup>2</sup>Die Form und der Aufbau geben Anlass zum Vergleich mit einem „CO“-Molekül.

$$K = \frac{m}{2}(\dot{\eta}_1^2 + \dot{\eta}_3^2) + \frac{M}{2}\dot{\eta}_2^2 \quad (7.7)$$

$$V = \frac{D}{2}(\eta_1 - \eta_2)^2 + \frac{D}{2}(\eta_2 - \eta_3)^2$$

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\dot{\eta}^T \mathbb{M} \dot{\eta} - \frac{1}{2}\eta^T \mathbb{D} \eta \quad (7.8)$$

Die Matrix der Kraftkonstanten ist

$$\mathbb{D} = \begin{pmatrix} D & -D & 0 \\ -D & 2D & -D \\ 0 & -D & D \end{pmatrix},$$

die Massenmatrix ist bereits diagonal:

$$\mathbb{M} = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & M & 0 \\ 0 & 0 & m \end{pmatrix} = \text{diag}\{m, M, m\}$$

$$\mathbb{M}^{1/2} = \text{diag}\{m^{1/2}, M^{1/2}, m^{1/2}\}$$

Aus (7.7) und (7.8) lassen sich Massen- und Kraftkonstantenmatrix entnehmen und zur dynamischen Matrix  $\Phi$  zusammensetzen. Man erhält

$$\Phi = \mathbb{M}^{-1/2} \mathbb{D} \mathbb{M}^{-1/2} = \begin{pmatrix} \frac{D}{m} & -\frac{D}{\sqrt{mM}} & 0 \\ -\frac{D}{\sqrt{mM}} & \frac{2D}{M} & -\frac{D}{\sqrt{mM}} \\ 0 & -\frac{D}{\sqrt{mM}} & \frac{D}{m} \end{pmatrix}$$

Die Eigenwerte<sup>3</sup>  $\omega_i^2$  der dynamischen Matrix  $\Phi$  sind somit:

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= 0 \\ \omega_2^2 &= \frac{D}{m} \\ \omega_3^2 &= \frac{D}{m} + \frac{2D}{M} \end{aligned}$$

Die entsprechenden Normalkoordinaten sind

$$\begin{aligned} \zeta_1(t) &= c_{1,0} + c_{1,1}t \\ \zeta_{2,3}(t) &= \Re(c_{2,3}e^{-i\omega_{2,3}t}) \end{aligned}$$

Für die gesuchten Auslenkungen  $\eta_k(t)$  erhält man (nach Berechnung der Eigenvektoren von  $\Phi$ ) somit folgende Linearkombination der Normalkoordinaten als Lösungen:

$$\begin{aligned} \eta_1(t) &= \frac{\zeta_1(t)}{\sqrt{2m+M}} + \frac{\zeta_2(t)}{\sqrt{2m}} - \sqrt{\frac{M}{2m(M+2m)}} \zeta_3(t) \\ \eta_2(t) &= \frac{\zeta_1(t)}{\sqrt{2m+M}} + \sqrt{\frac{2m}{M(M+2m)}} \zeta_3(t) \\ \eta_3(t) &= \frac{\zeta_1(t)}{\sqrt{2m+M}} - \frac{\zeta_2(t)}{\sqrt{2m}} - \sqrt{\frac{M}{2m(M-2m)}} \zeta_3(t) \end{aligned}$$

<sup>3</sup>Das sind wie oben gesehen die u.a. gesuchten Schwingungsfrequenzen.

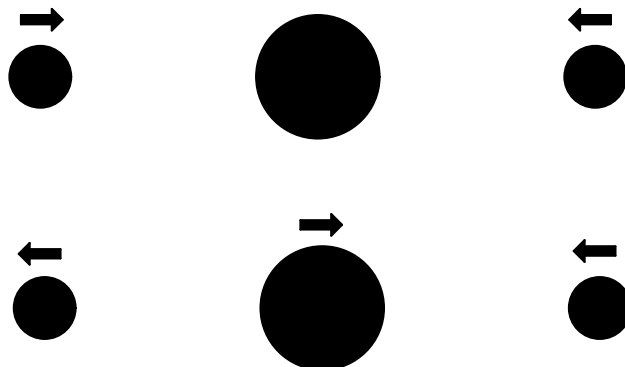


Abbildung 7.2: Moden des linearen Atoms,  $\omega_2 = \sqrt{\frac{D}{m}}$  oben,  $\omega_2 = \sqrt{\frac{D}{m} + \frac{2D}{M}}$  unten

Die Lösung  $\zeta_1(t)$  beschreibt eine gleichförmige Bewegung des Schwerpunkts des Moleküls, die Lösungen  $\zeta_{2/3}(t)$  beschreiben echte Schwingungszustände des Moleküls, wie in der Abbildung dargestellt.

## 7.6 Gedämpfter harmonischer Oszillator

Wir erweitern jetzt unsere Betrachtungen zum harmonischen Oszillator und berücksichtigen in den Bewegungsgleichungen noch den Effekt einer zur Geschwindigkeit  $\dot{\eta}(t)$  proportionalen Reibungskraft:

$$m\ddot{\eta}(t) + R\dot{\eta}(t) + D\eta(t) = 0$$

Hier ist  $\eta(t)$  die Auslenkung um die Gleichgewichtsposition  $q^{(0)}$  und  $R\dot{\eta}(t)$  mit  $R > 0$  ist die Reibungskraft. Mit dem Ansatz  $\eta(t) = \eta_0 e^{\lambda t}$  erhält man:  $\dot{\eta} = \lambda\eta$  und  $\ddot{\eta} = \lambda^2\eta$ . Eingesetzt in (7.6) folgt

$$(m\lambda^2 + R\lambda + D)\eta(t) = 0,$$

was unmittelbar auf die sog. *charakteristische Gleichung*

$$\lambda^2 + \frac{R}{m}\lambda + \frac{D}{m} = 0$$

führt. Diese quadratische Gleichung hat zwei charakteristische Zahlen als Lösung:

$$\lambda_{1/2} = -\frac{R}{2m} \pm \sqrt{\left(\frac{R}{2m}\right)^2 - \frac{D}{m}}$$

Zur Abkürzung setzen wir jetzt:

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{R}{2m} \\ \omega &= \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2} \\ \omega_0^2 &= \frac{D}{m} \end{aligned}$$

Also

$$\lambda_{1/2} = -\gamma \pm i\omega$$

In Abhängigkeit von den Werten, die die Konstanten  $R$ ,  $D$  und  $m$  haben, sind drei Fälle für den gedämpften harmonischen Oszillators zu unterscheiden: der *periodische Fall*, der *aperiodische Grenzfall* und der *Kriechfall*.

1. Der periodische Fall tritt für  $R^2 < 4mD$  ein. Er zeichnet sich durch komplexe Werte

$$\lambda_{1/2} = -\gamma \pm i\omega$$

für die charakteristischen Zahlen aus. Man erhält für die Auslenkung  $\eta(t)$  aus der Gleichgewichtslage die Lösung

$$\eta(t) = \frac{1}{2} (a_1 e^{\lambda_1 t} + a_2 e^{\lambda_2 t}) = \frac{1}{2} e^{-\gamma t} (a_1 e^{i\omega t} + a_2 e^{-i\omega t}),$$

wobei  $a_1$ ,  $a_2$  komplexe Amplituden sind. Da die Auslenkung  $\eta(t)$  eine reelle Zahl sein muss, d.h.  $\eta(t) = \eta^*(t)$ , gilt notwendig  $a_1^* = a_2 = |a| e^{i\phi}$ . Dies führt im periodischen Fall auf die allgemeine Lösung einer gedämpften harmonischen Schwingung:

$$\eta(t) = |a| e^{-\gamma t} \cos(\omega t + \phi)$$

2. Der *aperiodische Grenzfall* tritt für  $R^2 = 4mD$  ein, d.h.  $\omega = 0$ . Er zeichnet sich durch zwei gleiche reelle charakteristische Zahlen

$$\lambda_1 = \lambda_2 = -\gamma$$

aus. Man erhält als Lösung

$$\eta(t) = (a + bt) e^{-\gamma t}$$

Diese spezielle Lösung hat zahlreiche alltägliche Anwendungen, z.B. auch im Fahrzeugbau als Stoßdämpfer. Die Dämpfung der Federn von Automobilen und insbesondere Anhängern wird möglichst so eingestellt, dass sich der aperiodische Grenzfall ergibt. Es soll z.B. nach Überfahren einer Bodenwelle nachgedeutert werden, ohne dass es dabei zu echten Schwingungen kommt!

3. Der *Kriechfall* tritt für  $R^2 > 4mD$  ein. In dem Fall sind beide charakteristischen Zahlen negative reelle Zahlen:

$$\lambda_{1/2} = -\gamma \pm \sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2} \quad (7.9)$$

Man erhält als Lösung

$$\eta(t) = a e^{\lambda_1 t} + b e^{\lambda_2 t}$$

Ein derart gedämpfter Oszillator „kriecht“ nach Auslenkung zurück an seinen Gleichgewichtspunkt ( $\eta = 0$ ), ohne diesen allerdings jemals in endlicher Zeit zu erreichen.

## 7.7 Gedämpfter harmonischer Oszillator mit Antrieb: Resonanz

In Gegenwart einer Antriebskraft enthält die Differentialgleichung des gedämpften harmonischen Oszillators einen zusätzlichen Term  $F(t)$ , der die Antriebskraft repräsentiert. Die Bewegungsgleichung hat dann die Gestalt

$$m\ddot{\eta}(t) + R\dot{\eta}(t) + D\eta(t) = F(t).$$

Dies ist eine *inhomogene*, gewöhnliche lineare DGL zweiter Ordnung in der Zeit zur Bestimmung von  $\eta(t)$ .

Die allgemeine Lösung der *homogenen* DGL

$$m\ddot{\eta}_h(t) + R \cdot \dot{\eta}_h(t) + D \cdot \eta_h(t) = 0$$

wurde bereits im letzten Abschnitt hergeleitet:

$$\eta_h(t) = a_1 e^{\lambda_1 t} + a_2 e^{\lambda_2 t}$$

Gesucht wird nun eine *spezielle* Lösung  $\eta_s(t)$  der inhomogenen DGL mit dem Zweck, die allgemeine Lösung des inhomogenen Problems als Linearkombination der allgemeinen Lösung des homogenen Problems und einer speziellen Lösung des inhomogenen Problems darzustellen:

$$\eta(t) = \eta_h(t) + \eta_s(t) \quad (7.10)$$

Als spezielle Lösung der inhomogenen Differentialgleichung erfüllt  $\eta_s(t)$  per definitionem die DGL

$$m\ddot{\eta}_s(t) + R\dot{\eta}_s(t) + D\eta_s(t) = F(t)$$

Wir verwenden jetzt die Methode der *Variation der Konstanten* und suchen die spezielle Lösung in der Form

$$\eta_s(t) = c_1(t)e^{\lambda_1 t} + c_2(t)e^{\lambda_2 t},$$

wobei  $c_{1/2}(t)$  noch zu bestimmende unbekannte Funktionen der Zeit sind.

Die Addition der homogenen Lösung  $\eta_h(t)$  zur speziellen Lösung  $\eta_s(t)$  entspricht der Addition

$$c_{1/2}(t) \rightarrow c_{1/2}(t) + a_{1/2}$$

Da  $a_1$  und  $a_2$  allgemeine Amplituden sind, die zur Anpassung an Anfangswerte dienen, ist sofort klar, dass (7.10) auch tatsächlich die allgemeine Lösung der inhomogenen DGL ist.

Einsetzen des Ansatzes in die DGL zeigt, dass man die erste und zweite Ableitung von  $\eta_s(t)$  ausrechnen muss. Für die erste Ableitung ergibt sich

$$\dot{\eta}_s(t) = [\dot{c}_1(t) + \lambda_1 c_1(t)] e^{\lambda_1 t} + [\dot{c}_2 + \lambda_2 c_2] e^{\lambda_2 t}$$

Um für  $c_1(t)$  und  $c_2(t)$  möglichst einfache DGL'n zu gewinnen, die nur erste Ableitungen enthalten, fordern wir jetzt:

$$\dot{c}_1(t)e^{\lambda_1 t} + \dot{c}_2(t)e^{\lambda_2 t} = 0. \quad (7.11)$$

Diese Nebenbedingung stellt keine Einschränkung der Allgemeinheit dar, da wir ohnehin nur eine spezielle Lösung der inhomogenen DGL suchen!

Damit liefert die Berechnung der zweiten Ableitung von  $\eta_s(t)$ :

$$\ddot{\eta}_s(t) = [\lambda_1^2 c_1(t) + \lambda_1 \dot{c}_1(t)] e^{\lambda_1 t} + [\lambda_2^2 c_2(t) + \lambda_2 \dot{c}_2(t)] e^{\lambda_2 t}$$

Einsetzen in die inhomogene DGL der erzwungenen gedämpften Schwingung ergibt:

$$\underbrace{(m\lambda_1^2 + R\lambda_1 + D)c_1(t)}_{\equiv 0} e^{\lambda_1 t} + \underbrace{(m\lambda_2^2 + R\lambda_2 + D)c_2(t)}_{\equiv 0} e^{\lambda_2 t} + m\lambda_1 \dot{c}_1(t) e^{\lambda_1 t} + m\lambda_2 \dot{c}_2(t) e^{\lambda_2 t} = F(t)$$

Dies führt auf eine zweite Forderung für  $c_1(t)$  und  $c_2(t)$ :

$$\lambda_1 \dot{c}_1(t) e^{\lambda_1 t} + \lambda_2 \dot{c}_2(t) e^{\lambda_2 t} = \frac{F(t)}{m} \quad (7.12)$$

Beide Bedingungsgleichungen, (7.11) und (7.12), führen nach entsprechender (elementarer) Umstellung auf:

$$\begin{aligned} \dot{c}_1(t) &= \frac{e^{-\lambda_1 t} F(t)}{(\lambda_1 - \lambda_2)m} & \Rightarrow c_1(t) &= \int_{-\infty}^t dt' \frac{e^{-\lambda_1 t'} F(t')}{(\lambda_1 - \lambda_2)m} \\ \dot{c}_2(t) &= -\frac{e^{-\lambda_2 t} F(t)}{(\lambda_1 - \lambda_2)m} & \Rightarrow c_2(t) &= -\int_{-\infty}^t dt' \frac{e^{-\lambda_2 t'} F(t')}{(\lambda_1 - \lambda_2)m} \end{aligned}$$

Die Wahl der unteren Grenze bei der Integration als  $t = -\infty$  ist als willkürlich zu betrachten. Sie stellt nur ein Maß für den Zeitpunkt dar, an dem die äußere Kraft begonnen hat, auf das System zu wirken. Somit ergibt sich die gesuchte spezielle Lösung zu:

$$\begin{aligned} \eta_s(t) &= c_1(t)e^{\lambda_1 t} + c_2(t)e^{\lambda_2 t} \\ &= \int_{-\infty}^t dt' \frac{e^{\lambda_1(t-t')} - e^{\lambda_2(t-t')}}{\lambda_1 - \lambda_2} \cdot \frac{F(t')}{m} \end{aligned}$$

## Periodische äußere Kraft

Wir betrachten hier den Effekt einer periodischen äußeren Kraft mit Kreisfrequenz  $\Omega$  und Amplitude  $F_0$  :

$$F(t) = F_0 \cos(\Omega t + \alpha) = F_0 \Re e^{i(\Omega t + \alpha)}$$

Im Falle  $R^2 < 4mD$  sind  $\lambda_1$  und  $\lambda_2$  komplex konjugiert, d.h.  $\lambda_2 = \lambda_1^*$ , wobei  $\lambda_1 = -\gamma + i\omega$ . Dann ist

$$\frac{e^{\lambda_1(t-t')} - e^{\lambda_2(t-t')}}{\lambda_1 - \lambda_2} = e^{-\gamma(t-t')} \frac{e^{i\omega(t-t')} - e^{-i\omega(t-t')}}{2i\omega} = e^{-\gamma(t-t')} \frac{\sin[\omega(t-t')]}{\omega}$$

reell. Es folgt

$$\begin{aligned} \eta_s(t) &= \frac{F_0}{m} \int_{-\infty}^t dt' \frac{e^{\lambda_1(t-t')} - e^{\lambda_2(t-t')}}{\lambda_1 - \lambda_2} \Re e^{i(\Omega t' + \alpha)} \\ &= \frac{F_0}{m} \int_{-\infty}^t dt' e^{-\gamma(t-t')} \frac{\sin[\omega(t-t')]}{\omega} \Re e^{i(\Omega t' + \alpha)} \\ &= \frac{F_0}{m} \Re \left[ \int_{-\infty}^t dt' \frac{e^{\lambda_1(t-t')} - e^{\lambda_2(t-t')}}{\lambda_1 - \lambda_2} e^{i(\Omega t' + \alpha)} \right] \\ &= \frac{F_0}{m} \Re \left[ e^{i(\Omega t + \alpha)} \int_{-\infty}^t dt' \frac{e^{(\lambda_1 - i\Omega)(t-t')} - e^{(\lambda_2 - i\Omega)(t-t')}}{\lambda_1 - \lambda_2} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{F_0}{m} \Re \left[ e^{i(\Omega t + \alpha)} \int_{-\infty}^0 dt'' \frac{e^{-(\lambda_1 - i\Omega)t''} - e^{-(\lambda_2 - i\Omega)t''}}{\lambda_1 - \lambda_2} \right] \\
&= \frac{F_0}{m} \Re \left[ e^{i(\Omega t + \alpha)} \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \left( \frac{1}{-\lambda_1 + i\Omega} - \frac{1}{-\lambda_2 + i\Omega} \right) \right] \\
&= \frac{F_0}{m} \Re \left[ \frac{e^{i(\Omega t + \alpha)}}{(-\lambda_1 + i\Omega)(-\lambda_2 + i\Omega)} \right]
\end{aligned}$$

Das System schwingt mit der gleichen Frequenz  $\Omega$  wie die erzwingende Kraft  $F(t)$ , ist aber wegen der Dissipation  $R > 0$  phasenverschoben. Im letzten Schritt verwenden wir die Relationen

$$\begin{aligned}
\lambda_1 + \lambda_2 &= -\frac{R}{m} = -2\gamma \\
\lambda_1 \lambda_2 &= \frac{D}{m} = \omega_0^2
\end{aligned}$$

um den Realteil explizit zu berechnen:

$$\begin{aligned}
\eta_s(t) &= \frac{F_0}{m} \Re \left[ \frac{e^{i(\Omega t + \alpha)}}{\lambda_1 \lambda_2 - (\lambda_1 + \lambda_2) i\Omega - \Omega^2} \right] \\
&= \frac{F_0}{m} \Re \left[ \frac{e^{i(\Omega t + \alpha)}}{\omega_0^2 + i\frac{R}{m}\Omega - \Omega^2} \right] \\
&= \frac{F_0}{m} \frac{\cos(\Omega t + \alpha - \delta)}{\sqrt{[\omega_0^2 - \Omega^2]^2 + \frac{R^2}{m^2}\Omega^2}}
\end{aligned}$$

wobei

$$\tan(\delta) = \frac{\frac{R}{m}\Omega}{\omega_0^2 - \Omega^2}$$

Die Position des Maximums der Amplitude der erzwungenen Schwingung folgt aus der Forderung

$$\frac{\partial}{\partial \Omega} \frac{1}{\sqrt{[\omega_0^2 - \Omega^2]^2 + \frac{R^2}{m^2}\Omega^2}} \stackrel{!}{=} 0$$

zu

$$\Omega_{\max} = \sqrt{\omega_0^2 - \frac{R^2}{2m^2}}$$

Die maximale Amplitude bei  $\Omega = \Omega_{\max}$  ist

$$A_{\max} = \frac{F_0}{R\sqrt{\omega_0^2 - \frac{R^2}{4m^2}}}$$

Für  $R \rightarrow 0$  und  $\Omega \rightarrow \omega$  wächst die Amplitude über alle Grenzen. Diese Erscheinung heißt *Resonanz*. Gegenüber dem Resonanzfall des idealen ungedämpften Systems ist die Frequenz  $\Omega_{\max}$  an der Resonanzstelle aufgrund der Dämpfung „verstimmt“ hin zu kleineren Frequenzen. Für kleine Dämpfung  $R \ll 2\omega_0 m$  ist die Halbwertsbreite des Resonanzpeaks  $\cong \sqrt{3}\frac{R}{m}$ .

## Kapitel 8

# Kontinuumsmechanik

### 8.1 Einleitung

Die Vorlesung behandelte bis jetzt Methoden und Ergebnisse für punktmekanische Probleme. Alle Überlegungen bezogen sich auf Massenpunkte und alle Resultate wurden für Massenpunkte hergeleitet.

Im vorangegangenen Kapitel behandelten wir gekoppelte schwingungsfähige Systeme, die aus einer Anzahl  $N$  diskreter Punktmassen zusammengesetzt sind und durch innere Wechselwirkungskräfte zwischen den Teilchen („kleine Federn“) zusammengehalten werden, wobei die  $N$  Teilchen des Systems Schwingungen gegen- und miteinander ausführen können.

In diesem Kapitel entwickeln wir die Anfangsgründe einer analytischen Beschreibung der Mechanik von Kontinua, indem wir anstatt mit einzelnen Teilchen nunmehr mit dem Konzept der Teilchendichte arbeiten. Das bedeutet, dass anstelle der Summation über die Positionen  $\mathbf{r}_n$  der  $N$  Teilchen des Systems nunmehr eine Integration über das Volumen  $\mathbb{V}$  des Systems mit der Teilchendichte  $n(\mathbf{r})$  als Gewichtsfunktion erfolgt, wobei gilt  $\int_{\mathbb{V}} d^3r n(\mathbf{r}) = N$ .

Die angestellten Betrachtungen dürfen im Limes, wenn die Wellenlänge der elastischen Moden des Systems im Vergleich zum mittleren Abstand der Teilchen des Systems groß wird, hohe Allgemeingültigkeit beanspruchen und können ohne Weiteres auf andere Gebiete der Physik, z.B. die Hydrodynamik, Thermodynamik, Plasmaphysik oder die Elektrodynamik der kontinuierlichen Medien, übertragen werden.

### 8.2 Kontinuumsmechanik

Als Ausgangspunkt der Überlegungen sollen Massenpunkte (Atome) mit der Masse  $m$  auf einem Gitter  $\Lambda$  mit der Gitterkonstanten  $a$  betrachtet werden. Die instantane Position  $\mathbf{q}_n(t)$  des  $n$ -ten Atoms im Gitter ist

$$\mathbf{q}_n(t) = \mathbf{R}_n + \eta_n(t),$$

wobei  $\mathbf{R}_n$  die Gleichgewichtsposition des betreffenden Atoms im Kristallgitter  $\Lambda$  bezeichnet und  $\eta_n(t)$  die instantane Auslenkung aus der Gleichgewichtsposition ist. Der auftretende Index  $n = (n_1, n_2, n_3)$  ist ein *Multiindex* mit  $n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$ . Als Gittervektor ist  $\mathbf{R}_n$  Linearkombination von linear unabhängigen Basisvektoren  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$  und  $\mathbf{b}_3$ :

$$\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_{n_1, n_2, n_3} = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3$$

Das allereinfachste denkbare Gitter besteht aus einer einzigen Atomsorte und ist kubisch. So ein Kristalltyp ist in der Natur sehr selten, er ist tatsächlich beim metallischen Element Polonium



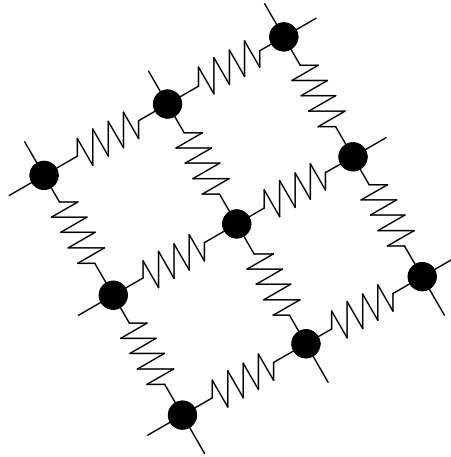


Abbildung 8.1: Gitter mit Atomabstand  $a$ . Die schwarzen Punkte symbolisieren die Position der Atome im Gleichgewichtszustand, die Federn symbolisieren die Kräfte auf die Atome bei Auslenkung aus der Ruhelage.

realisiert. Häufig weisen metallische Kristalle eine flächenzentrierte (fcc-), raumzentrierte (bcc-) oder hexagonale (hcp-) Symmetrie auf. Im Gegensatz zu den einfachen Metallen sind Ionenkristalle aus zwei oder mehr Elementen aufgebaut, z.B. Kochsalz (NaCl). Man hat es dann mit einem Gitter mit Basis zu tun. Mehr dazu findet sich in Büchern der Festkörperphysik.

Wir betrachten hier den einfachsten Fall, d.h. nur einatomige Kristalle. Nach dem Gesagten ist  $\eta_n(t) = \eta(\mathbf{R}_n, t)$  die Auslenkung eines Atoms aus seiner Gleichgewichtsposition  $\mathbf{R}_n$  im Gitter. Dabei wollen wir uns auf kleine Auslenkungen beschränken:

$$|\eta(\mathbf{R}_n, t)| \ll a$$

Bei einer langwelligen Anregung mit Wellenlänge  $\lambda \gg a$  werden viele Atome im Kristall zugleich aus ihrer jeweiligen Gleichgewichtsposition ausgelenkt. Dann variiert  $\eta(\mathbf{R}_n, t)$  als Funktion  $\mathbf{R}_n$  nur wenig auf der Skala des atomaren Abstands, d.h. nur für  $|\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m| \gg a$  ist  $|\eta(\mathbf{R}_n, t) - \eta(\mathbf{R}_m, t)|$  merklich von Null verschieden, wie in der Abbildung angedeutet: In die-



Abbildung 8.2: Änderung von  $\eta_\alpha$  über größere Distanz

sem Fall darf die interpolierende Funktion  $\eta(\mathbf{r}, t)$  bezüglich der Lagekoordinate  $\mathbf{r}$  als „glatte“ (d.h. mindestens zweifach differenzierbare) Funktion von  $\mathbf{r}$  und  $t$  angesehen werden.

Bei Beschränkung auf kleine Auslenkungen aus der Ruhelage ergibt sich die kinetische Energie der Atome des Kristalls als Summe der Einzelbeiträge:

$$K = \frac{m}{2} \sum_{\substack{\mathbf{R}_n \in \Lambda \\ \alpha \in \{1,2,3\}}} \frac{\partial}{\partial t} \eta_\alpha(\mathbf{R}_n, t) \frac{\partial}{\partial t} \eta_\alpha(\mathbf{R}_n, t)$$

Hier ist  $\eta_\alpha(\mathbf{R}_n, t)$  die  $\alpha$ -te Komponente des kartesischen Vektors  $\eta(\mathbf{R}_n, t)$ .

Den Übergang zum kontinuierlichen Medium mit Teilchendichte  $n(\mathbf{r})$  und Volumen  $\mathbb{V}$  ist offensichtlich:

$$K = \int_{\mathbb{V}} d^3r \frac{m}{2} n(\mathbf{r}) \sum_{\alpha \in \{1,2,3\}} \frac{\partial}{\partial t} \eta_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \eta_{\alpha}(\mathbf{r}, t)$$

Für Punktteilchen ist die Teilchendichte zu  $n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_n \in \Lambda} \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$  gegeben.

Für Systeme mit Zweiteilchenwechselwirkung  $v = v[\mathbf{q}_n(t) - \mathbf{q}_m(t)]$  ist die gesamte potentielle Energie  $V$  des Systems gleich der Summe

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n, n' \\ n \neq n'}} v[\mathbf{q}_n(t) - \mathbf{q}_{n'}(t)] \quad (8.1)$$

Dann folgt für kleine Auslenkungen aus der Ruhelage

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{n, n' \\ n \neq n'}} v[\mathbf{q}_n(t) - \mathbf{q}_{n'}(t)] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{n, n' \\ n \neq n'}} v[\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'} + \eta(\mathbf{R}_n, t) - \eta(\mathbf{R}_{n'}, t)] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{n, n' \\ n \neq n'}} \left\{ \begin{aligned} &v(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}) + \sum_{\alpha} \left[ \frac{\partial}{\partial s_{\alpha}} V(\mathbf{s}) \right]_{\mathbf{s}=\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}} [\eta_{\alpha}(\mathbf{R}_n, t) - \eta_{\alpha}(\mathbf{R}_{n'}, t)] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha'} \left[ \frac{\partial^2}{\partial s_{\alpha} \partial s_{\alpha'}} V(\mathbf{R}) \right]_{\mathbf{s}=\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}} [\eta_{\alpha}(\mathbf{R}_n, t) - \eta_{\alpha}(\mathbf{R}_{n'}, t)] [\eta_{\alpha'}(\mathbf{R}_n, t) - \eta_{\alpha'}(\mathbf{R}_{n'}, t)] \\ &+ \dots \end{aligned} \right\} \end{aligned}$$

Der lineare Term in  $\frac{\partial V(\mathbf{R})}{\partial s_{\alpha}}$  fällt weg, wenn um die Gleichgewichtsposition entwickelt wird (siehe **Kleine Schwingungen**). In Gegenwart von äußeren Kräften existieren allerdings auch lineare Terme  $\sim \frac{\partial}{\partial s_{\alpha}} V(\mathbf{s})$ , die den äußeren Kräften das Gleichgewicht halten.

Nach dem Gesagten ergibt sich bei Beschränkung auf kleine Auslenkungen um die Gleichgewichtspositionen der Atome für die potentielle Energie  $V$  des Systems die Darstellung:

$$V = V_0 + \frac{1}{2} \sum_{n, n'} \sum_{\alpha, \alpha'} v_{\alpha, \alpha'}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}) [\eta_{\alpha}(\mathbf{R}_n, t) - \eta_{\alpha}(\mathbf{R}_{n'}, t)] [\eta_{\alpha'}(\mathbf{R}_n, t) - \eta_{\alpha'}(\mathbf{R}_{n'}, t)]$$

Die Differenzen der Auslenkungen an verschiedenen Positionen  $\mathbf{R}_n$  und  $\mathbf{R}_{n'}$  lassen sich im eingangs diskutierten langwelligen Limes aufgrund des Umstands, dass sie als Faktoren vor der rasch abfallenden Funktion

$$v_{\alpha, \alpha'}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}) = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial^2}{\partial s_{\alpha} \partial s_{\alpha'}} V(\mathbf{s}) \right]_{\mathbf{s}=\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}}$$

aufzutreten, in guter Näherung durch eine Gradientenentwicklung der interpolierenden Funktion  $\eta_{\alpha}[\mathbf{r}, t]$  ersetzen:

$$\begin{aligned} \eta_{\alpha}[\mathbf{R}_n, t] &= \eta_{\alpha} \left[ \frac{\mathbf{R}_n + \mathbf{R}_{n'}}{2} + \frac{\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}}{2}, t \right] \\ &= \eta_{\alpha} \left[ \frac{\mathbf{R}_n + \mathbf{R}_{n'}}{2}, t \right] + \left( \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial R_{\gamma}} \right)_{\mathbf{R}=\frac{\mathbf{R}_n + \mathbf{R}_{n'}}{2}} \cdot \frac{R_{n, \gamma} - R_{n', \gamma}}{2} + \dots \\ \eta_{\alpha}[\mathbf{R}_{n'}, t] &= \eta_{\alpha} \left[ \frac{\mathbf{R}_n + \mathbf{R}_{n'}}{2} - \frac{\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}}{2}, t \right] \\ &= \eta_{\alpha} \left[ \frac{\mathbf{R}_n + \mathbf{R}_{n'}}{2}, t \right] - \left( \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial R_{\gamma}} \right)_{\mathbf{R}=\frac{\mathbf{R}_n + \mathbf{R}_{n'}}{2}} \cdot \frac{R_{n, \gamma} - R_{n', \gamma}}{2} + \dots \end{aligned}$$

Damit folgt für (8.2)

$$\begin{aligned}
V &= V_0 + \frac{1}{2} \sum_{n,n'} \sum_{\alpha,\alpha';\gamma,\gamma'} v_{\alpha,\alpha'}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}) \left[ \left( \frac{\partial \eta_\alpha}{\partial R_\gamma} \right)_{\mathbf{R}=\frac{\mathbf{R}_n+\mathbf{R}_{n'}}{2}} (R_{n,\gamma} - R_{n',\gamma}) \right] \\
&\quad \left[ \left( \frac{\partial \eta_{\alpha'}}{\partial R_{\gamma'}} \right)_{\mathbf{R}=\frac{\mathbf{R}_n+\mathbf{R}_{n'}}{2}} (R_{n,\gamma'} - R_{n',\gamma'}) \right] \\
&= V_0 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\alpha';\gamma,\gamma'} \sum_{\mathbf{R}_n, \mathbf{R}_{n'}} v_{\alpha,\alpha'}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}) (R_{n,\gamma} - R_{n',\gamma}) (R_{n,\gamma'} - R_{n',\gamma'}) \\
&\quad \left[ \left( \frac{\partial \eta_\alpha(\mathbf{R}, t)}{\partial R_\gamma} \right) \left( \frac{\partial \eta_{\alpha'}(\mathbf{R}, t)}{\partial R_{\gamma'}} \right) \right]_{\mathbf{R}=\frac{\mathbf{R}_n+\mathbf{R}_{n'}}{2}}
\end{aligned}$$

Wir summieren jetzt anstelle über  $\mathbf{R}_n$  und  $\mathbf{R}_{n'}$  über alle Kombinationen  $\mathbf{R} = \frac{\mathbf{R}_n+\mathbf{R}_{n'}}{2}$  und  $\mathbf{s} = \mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}$ :

$$V = V_0 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\alpha';\gamma,\gamma'} \sum_{\mathbf{R}} \left( \sum_{\mathbf{s}} v_{\alpha,\alpha'}(\mathbf{s}) s_\gamma s_{\gamma'} \right) \left( \frac{\partial \eta_\alpha(\mathbf{R}, t)}{\partial R_\gamma} \right) \left( \frac{\partial \eta_{\alpha'}(\mathbf{R}, t)}{\partial R_{\gamma'}} \right) \quad (8.2)$$

Die auftretenden Terme

$$C_{\alpha\gamma,\alpha'\gamma'} = \sum_{\mathbf{s}} v_{\alpha,\alpha'}(\mathbf{s}) s_\gamma s_{\gamma'}$$

bezeichnen die sog. *elastischen Konstanten* oder auch *Kraftkonstanten* des Kristalls. Sind die elastischen Konstanten nicht positiv definit, so ist der Kristall unter Umständen instabil, d.h. er kann buchstäblich „auseinanderfliegen“.

Ganz offensichtlich besitzen die Kraftkonstanten  $C_{\alpha\gamma,\alpha'\gamma'}$  die Symmetrie:

$$C_{\alpha\gamma,\alpha'\gamma'} = C_{\alpha'\gamma,\alpha\gamma} = C_{\alpha\gamma',\alpha'\gamma}$$

Im Kontinuumsmlimes ergibt sich nach dem Gesagten mit der Definition

$$C_{\alpha\gamma,\beta\lambda}(\mathbf{r}) = n(\mathbf{r}) C_{\alpha\gamma,\beta\lambda} \quad (8.3)$$

und Weglassen einer für das weitere irrelevanten Konstanten  $V_0$  für die potentielle Energie des Systems der Ausdruck:

$$V = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{V}} d^3r \sum_{\alpha,\beta;\gamma,\lambda} C_{\alpha\gamma,\beta\lambda}(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial r_\gamma} \eta_\alpha(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial r_\lambda} \eta_\beta(\mathbf{r}, t) - \int_{\mathbb{V}} d^3r \sum_{\alpha} f_\alpha(\mathbf{r}, t) \eta_\alpha(\mathbf{r}, t)$$

Dabei ist  $f_\alpha(\mathbf{r}, t)$  die Kraftdichte einer äußeren Kraft<sup>1</sup>.

In einem weiteren Schritt zerlegen wir jetzt  $\frac{\partial}{\partial r_\gamma} \eta_\alpha(\mathbf{r}, t)$  in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Teil:

$$\frac{\partial}{\partial r_\gamma} \eta_\alpha(\mathbf{r}, t) = u_{\alpha,\gamma}(\mathbf{r}, t) + \omega_{\alpha,\gamma}(\mathbf{r}, t),$$

also  $u_{\alpha,\gamma} = u_{\gamma,\alpha}$  und  $\omega_{\alpha,\gamma} = -\omega_{\gamma,\alpha}$ . Es folgt

$$\begin{aligned}
u_{\alpha,\gamma}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial r_\gamma} \eta_\alpha + \frac{\partial}{\partial r_\alpha} \eta_\gamma \right) \\
\omega_{\alpha,\gamma}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial r_\gamma} \eta_\alpha - \frac{\partial}{\partial r_\alpha} \eta_\gamma \right)
\end{aligned}$$

$u_{\alpha,\gamma}$  ist der symmetrische Teil und beschreibt eine lokale Verzerrung am Ort  $\mathbf{r}$  zur Zeit  $t$ . Dagegen ist  $\omega_{\alpha,\gamma}$  der antisymmetrische Teil und beschreibt eine lokale Rotation am Ort  $\mathbf{r}$  zur

<sup>1</sup>Offensichtlich hat der hintere Term die Form des Hookeschen Gesetzes.

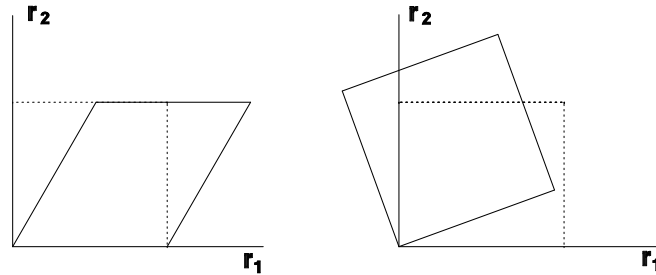


Abbildung 8.3: Verzerrung und Rotation des Mediums

Zeit  $t$ . Ist das Wechselwirkungspotential zwischen zwei Teilchen im Kristall nur eine Funktion des Abstands, also  $v = v(|\mathbf{q}_j - \mathbf{q}_\ell|)$ , dann ist die Verzerrungsenergie in führender Ordnung nur von  $u_{\alpha\gamma}$  ab, aber nicht von  $\omega_{\alpha\gamma}$  abhängig! Das heißt eine infinitesimale Drehung kostet dann keine Verzerrungsenergie<sup>2</sup>.

### 8.3 Lagrange-Formalismus für Felder

Wir wollen nun den Lagrangeformalismus für Felder formulieren. Wir betrachten dazu die so genannte Lagrangedichte  $\mathcal{L} \left[ \eta_\alpha(\mathbf{r}, t), \frac{\partial}{\partial t} \eta_\alpha(\mathbf{r}, t), \frac{\partial}{\partial r_\beta} \eta_\alpha(\mathbf{r}, t), t \right]$ . Integration über das gesamte Volumen des Mediums liefert dann die Lagrangefunktion der Freiheitsgrade des Kristalls in der Kontinuumsnäherung:

$$\mathcal{L}(t) = K - V = \int_{\mathbb{V}} d^3r \mathcal{L} \left[ \eta_\alpha(\mathbf{r}, t), \frac{\partial}{\partial t} \eta_\alpha(\mathbf{r}, t), \frac{\partial}{\partial r_\beta} \eta_\alpha(\mathbf{r}, t), t \right]$$

Die Integration der Lagrange-Dichte  $\mathcal{L}$  über die Orte  $\mathbf{r}$  der Teilchen  $\eta_\alpha(\mathbf{r}, t)$  entspricht der Summation über die Lagekoordinaten der Teilchen im *diskreten* Formalismus für Massenpunkte. Ein wichtiger Unterschied zum diskreten Formalismus ist hier, dass neben den Zeitableitungen  $\frac{\partial}{\partial t} \eta_\alpha(\mathbf{r}, t)$  auch die Gradienten  $\frac{\partial}{\partial r_\beta} \eta_\alpha(\mathbf{r}, t)$  der Felder  $\eta_\alpha(\mathbf{r}, t)$  als Variable auftauchen. Integration über die Zeit  $t$  liefert dann wie gehabt das Wirkungsintegral des Systems:

$$A(t_2, t_1) = \int_{t_1}^{t_2} dt \mathcal{L}(t) = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{\mathbb{V}} d^3r \mathcal{L} \left[ \eta_\alpha(\mathbf{r}, t), \frac{\partial}{\partial t} \eta_\alpha(\mathbf{r}, t), \frac{\partial}{\partial r_\beta} \eta_\alpha(\mathbf{r}, t), t \right]$$

Nach dem Hamilton'schen Prinzip ergibt sich die physikalische Lösung  $\eta_\alpha(\mathbf{r}, t)$  für die Auslenkungen aus der Bedingung:

$$\tilde{A}(t_2, t_1; \varepsilon) \stackrel{!}{=} A(t_2, t_1) + o(\varepsilon^2),$$

d.h. die Änderung der Wirkung soll bei einer Variation

$$\tilde{\eta}_\alpha(\mathbf{r}, t) = \eta_\alpha(\mathbf{r}, t) + \varepsilon \cdot \xi_\alpha(\mathbf{r}, t)$$

um die *physikalische* Lösung  $\eta_\alpha(\mathbf{r}, t)$  von zweiter Ordnung bzgl. des Parameters  $\varepsilon$  klein sein. Dabei soll noch die Nebenbedingung erfüllt sein, dass

$$\xi_\alpha(\mathbf{r}_s, t) = 0 \quad \forall \mathbf{r}_s \in \partial\mathbb{V} \text{ und } \forall t,$$

<sup>2</sup>Dieser Schluss gilt nur in erster Ordnung, bereits in zweiter Ordnung kommen Torsionseffekte hinzu, so dass Drehungen dann ebenfalls eine Verzerrung des Kristalls bewirken können.

d.h. auf der Oberfläche  $\partial\mathbb{V}$  des Körpers mit Volumen  $\mathbb{V}$  ist  $\eta_\alpha(\mathbf{r}, t)$  für alle Zeiten  $t$  bekannt und vorgegeben.

Es folgt durch Einsetzen:

$$\begin{aligned} \tilde{A}(t_2, t_1; \varepsilon) - A(t_2, t_1) &= \varepsilon \cdot \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{\mathbb{V}} d^3r \left( \left( \sum_{\alpha} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_{\alpha}(\mathbf{r}, t)} \xi_{\alpha}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial [\frac{\partial}{\partial t} \eta_{\alpha}(\mathbf{r}, t)]} \frac{\partial}{\partial t} \xi_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \right) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\alpha, \beta} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial [\frac{\partial}{\partial r_{\beta}} \eta_{\alpha}(\mathbf{r}, t)]} \frac{\partial}{\partial r_{\beta}} \xi_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \right) + o(\varepsilon^2) \\ &= \varepsilon \left\{ \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{\mathbb{V}} d^3r \left\{ \begin{aligned} &\sum_{\alpha} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_{\alpha}(\mathbf{r}, t)} \xi_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \\ & - \sum_{\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial [\frac{\partial}{\partial t} \eta_{\alpha}(\mathbf{r}, t)]} \right) \xi_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \\ & - \sum_{\alpha, \beta} \frac{\partial}{\partial r_{\beta}} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial [\frac{\partial \eta_{\alpha}(\mathbf{r}, t)}{\partial r_{\beta}}]} \right) \xi_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \right\} \right. \\ &\quad \left. + \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{\mathbb{V}} d^3r \left\{ \begin{aligned} &\sum_{\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial [\frac{\partial \eta_{\alpha}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}] } \xi_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \right) \\ & + \sum_{\alpha, \beta} \frac{\partial}{\partial r_{\beta}} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial [\frac{\partial \eta_{\alpha}(\mathbf{r}, t)}{\partial r_{\beta}}]} \xi_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \right) \end{aligned} \right\} \right\} + o(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

Das Anwenden des Satzes von Gauß,

$$\int_{\mathbb{V}} d^3r \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial r_{\beta}} F_{\beta}(\mathbf{r}) = \int_{\partial\mathbb{V}} df \sum_{\beta} \hat{n}_{\beta} F_{\beta}(\mathbf{r}_s),$$

verwandelt die Integrale in der zweiten Zeile über das Volumen  $\mathbb{V}$  nun in Flächenintegrale über die Oberfläche  $\partial\mathbb{V}$  des Volumen  $\mathbb{V}$ , wobei  $\hat{n}_{\beta}$  die  $\beta$ -Komponente der nach aussen orientierten Flächennormalen  $\hat{n}$  von  $\partial\mathbb{V}$  ist. Wegen unserer Voraussetzungen  $\xi_{\alpha}(\mathbf{r}, t_1) = 0 = \xi_{\alpha}(\mathbf{r}, t_2)$  für  $\mathbf{r} \in \mathbb{V}$  zu den Zeiten  $t_1$  und  $t_2$ , sowie  $\xi_{\alpha}(\mathbf{r}_S, t) = 0$  für  $\mathbf{r}_S \in \partial\mathbb{V}$  zu beliebiger Zeit  $t$ , verschwinden die Terme in der zweiten Zeile identisch.

Halten wir die Forderung  $\tilde{A}(t_2, t_1; \varepsilon) - A(t_2, t_1) \stackrel{!}{=} o(\varepsilon^2)$  aufrecht, so ergeben sich aus dem verlangten Verschwinden der Terme proportional zu  $\varepsilon$  die Lagrangschen-Bewegungsgleichungen für die physikalischen Felder  $\eta_{\alpha}(\mathbf{r}, t)$  für  $\alpha \in \{1, 2, 3\}$ :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_{\alpha}(\mathbf{r}, t)} - \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial [\frac{\partial}{\partial t} \eta_{\alpha}(\mathbf{r}, t)]} \right) - \sum_{\beta \in \{1, 2, 3\}} \frac{\partial}{\partial r_{\beta}} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial [\frac{\partial}{\partial r_{\beta}} \eta_{\alpha}(\mathbf{r}, t)]} = 0 \quad (8.4)$$

Der dritte Term in dieser Bewegungsgleichung ist gerade die Divergenz des Vektors der *Impulsflussdichte*.

## 8.4 Elastisches Medium in harmonischer Näherung

Die Lagrange-Dichte eines elastischen Mediums hat bei Beschränkung auf kleine Auslenkungen aufgrund der Betrachtungen des vorangegangenen Abschnitts für die Differenz  $K - V$  aus kinetischer Energie und potentieller Energie  $V$  die Gestalt:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \mu(\mathbf{r}) \sum_{\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \eta_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \eta_{\alpha}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta; \gamma, \lambda} C_{\alpha\gamma, \beta\lambda}(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial r_{\gamma}} \eta_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial r_{\lambda}} \eta_{\beta}(\mathbf{r}, t) + \sum_{\alpha} f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \eta_{\alpha}(\mathbf{r}, t)$$

Hier ist  $\mu(\mathbf{r}) = m \cdot n(\mathbf{r})$  die Massendichte.

Durch Einsetzen in (8.4) finden wir sofort ein System gekoppelter Bewegungsgleichungen zur Beschreibung der elastischen Schwingungen eines Kristalls im Grenzfall großer Wellenlänge  $\lambda \gg a$ :

$$\mu(\mathbf{r}) \frac{\partial^2}{\partial t^2} \eta_\alpha(\mathbf{r}, t) - \sum_{\gamma, \beta, \lambda} C_{\alpha, \gamma, \beta, \lambda}(\mathbf{r}) \frac{\partial^2}{\partial r_\gamma \partial r_\lambda} \eta_\beta(\mathbf{r}, t) = f_\alpha(\mathbf{r}, t)$$

Die Inhomogenität  $f_\alpha(\mathbf{r}, t)$  in obiger Gleichung ist die Dichte einer von außen vorgegebenen Kraft, die auf den Kristall einwirkt.

Die erwähnte Symmetrie der Kraftkonstanten  $C_{\alpha\gamma, \beta\lambda}$  gibt Anlass zur Definition des *Spannungstensors*:

$$\sigma_{\alpha\gamma}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\beta, \lambda} C_{\alpha, \gamma, \beta, \lambda} u_{\beta, \lambda}(\mathbf{r}, t)$$

Fügt man diese Definition in Gleichung (8.4) ein, erhält man für die Bewegungsgleichung eines elastischen Mediums den Ausdruck:

$$\mu(\mathbf{r}) \frac{\partial^2}{\partial t^2} \eta_\alpha - \sum_{\gamma} \frac{\partial}{\partial r_\gamma} \sigma_{\alpha\gamma}(\mathbf{r}, t) = f_\alpha(\mathbf{r}, t)$$

Der zweite Term stellt die Divergenz des Spannungstensors dar.

Wenn die Spannung  $\sigma_{\alpha, \gamma}(\mathbf{r}, t)$  räumlich variiert, resultiert eine innere Kraftdichte  $-\sum_{\gamma} \frac{\partial}{\partial r_\gamma} \sigma_{\alpha\gamma}(\mathbf{r}, t)$ ,

die im statischen Grenzfall der äußeren Kraftdichte  $f_\alpha(\mathbf{r}, t)$  das Gleichgewicht hält.

Es existiert eine instruktive Analogie zum Coulomb-Gesetz der Elektrostatik. Eine punktförmige *äußere* Kraftdichte  $f_\alpha(\mathbf{r})$  an der Stelle  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$  verursacht in der Tat eine *langreichweitige* (!) Auslenkung  $\eta_\alpha(\mathbf{r})$  der Atome des Kristalls aus der Gleichgewichtsposition, die (im einfachsten Fall) proportional zu  $\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^2}$  abfällt. Dies ist zum Verständnis der Vorgänge beim Kristallwachstum von Bedeutung.

In elastischen Medien können viele verschiedene Arten von Wellen auftreten. Bekannt sind z.B. Erdbebenwellen, die nach einem Erdstoß sowohl als Longitudinalwellen, als auch als Transversalwellen im Erdinneren propagieren. Darüber hinaus existieren (sehr gefährliche) Oberflächenwellen, die nur entlang der Erdoberfläche propagieren können.

Die im nächsten Abschnitt vorgestellten Überlegungen zu Medien mit unstetiger Dichte und entsprechend unterschiedlicher Wellenausbreitungsgeschwindigkeit spielen nicht nur in der Geophysik eine wichtige Rolle. So lässt sich durch Reflexion von Schallwellen an Strukturen innerhalb eines elastischen Mediums durch Laufzeitmessung das Dichteprofil des betreffenden Mediums rekonstruieren. Dies ist ein übliches Verfahren in der Materialphysik zur zerstörungsfreien Untersuchung von Werkstoffen.

### 8.4.1 Wellengleichung in D=1 Dimensionen

Wir betrachten eine zwischen zwei Punkten eingespannte (metallische) Saite mit homogener Massenverteilung. Für so ein System erhält man bei Beschränkung auf langwellige elastische transversale Anregungen ( $D = 1$ ) als Lagrangedichte

$$\mathcal{L} = \frac{\mu}{2} [\partial_t \eta(x, t)]^2 - \frac{k}{2} [\partial_x \eta(x, t)]^2$$

Definiert man die Ausbreitungsgeschwindigkeit zu  $c = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ , folgt hieraus sofort die Bewegungsgleichung:

$$\left( \frac{1}{c^2} \partial_t^2 - \partial_x^2 \right) \eta(x, t) = 0 \quad (8.5)$$

Das ist die Wellengleichung der schwingenden Saite ( $D = 1$ ).

Wir leiten jetzt die sog. d'Alembert'sche Lösung dieser Wellengleichung her. Dazu definieren wir

$$\begin{aligned} u &= x - ct & v &= x + ct \\ x &= \frac{u + v}{2} & ct &= \frac{v - u}{2} \end{aligned}$$

Transformation auf die neuen Koordinaten  $u, v$  ergibt mit

$$\eta(x, t) = \tilde{\eta}(u, v) = \tilde{\eta}[u(x, t), v(x, t)]$$

unter Verwendung der Kettenregel:

$$\partial_x \eta = (\partial_u + \partial_v) \tilde{\eta}$$

$$\frac{1}{c} \partial_t \eta = (-\partial_u + \partial_v) \tilde{\eta}$$

Einsetzen in die  $D = 1$  Wellengleichung liefert<sup>3</sup>:

$$\begin{aligned} 0 &= \left( \frac{1}{c^2} \partial_t^2 - \partial_x^2 \right) \eta = \left( \frac{1}{c} \partial_t - \partial_x \right) \left( \frac{1}{c} \partial_t + \partial_x \right) \eta \\ &= (-\partial_u + \partial_v - \partial_u - \partial_v) (-\partial_u + \partial_v + \partial_u + \partial_v) \tilde{\eta}(u, v) \\ &= -4 \partial_u \partial_v \tilde{\eta}(u, v) \end{aligned}$$

Hieraus folgt unschwer die allgemeine Lösung

$$\tilde{\eta}(u, v) = f(v) + g(u)$$

Dies impliziert jetzt die folgende Form der allgemeinen Lösung der  $D = 1$  Wellengleichung:

$$\eta(x, t) = f(x - ct) + g(x + ct)$$

Dabei sind  $f(s), g(s)$  zunächst beliebige zweifach differenzierbare Funktionen. Zur vollständigen

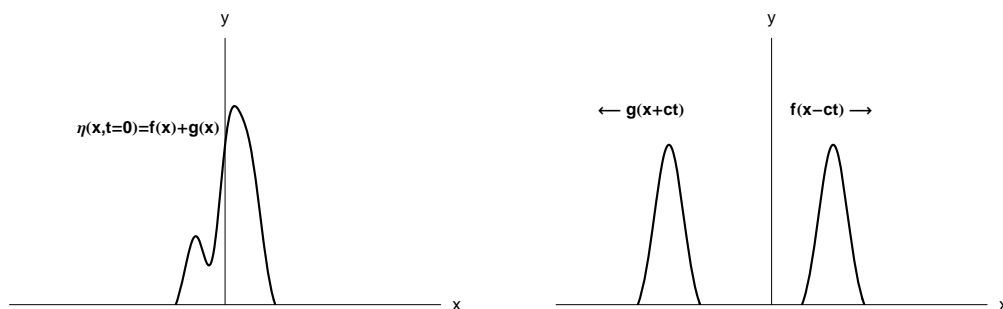


Abbildung 8.4: Saite, zur Zeit  $t = 0$  bzw. zur Zeit  $t > 0$

Lösung der Wellengleichung müssen nun Anfangswerte vorgegeben werden:

<sup>3</sup>Die Wellengleichung gehört zur Klasse der hyperbolischen partiellen Differentialgleichungen.

(a) es ist ein Auslenkungsprofil  $\eta_0(x)$  der Saite zur Zeit  $t = 0$  vorgegeben:

$$[\eta(x, t)]_{t=0} = \eta_0(x)$$

(b) es ist ein Geschwindigkeitsprofil bei der Auslenkung der Saite zur Zeit  $t = 0$  vorgegeben:

$$\left[\frac{1}{c}\partial_t\eta(x, t)\right]_{t=0} = \eta_1(x)$$

Im allgemeinen Fall benötigt man beide Funktionen,  $\eta_0(x)$  und  $\eta_1(x)$ , zur Lösung der Wellengleichung, u.z. dann wenn sowohl Profile für die Anfangswerte als auch für Anfangsgeschwindigkeiten zur Startzeit  $t = 0$  vorgegeben sind.

Es gilt nach dem Gesagten

$$\begin{aligned}\eta_0(x) &= f(x) + g(x) \\ \eta_1(x) &= -f'(x) + g'(x)\end{aligned}$$

Dann lässt sich die Form der Funktionen  $f(x - ct)$  und  $g(x + ct)$  tatsächlich mit den Profildfunktionen  $\eta_0(x)$  und  $\eta_1(x)$  festlegen:

$$\begin{aligned}2\eta(x, t) &= 2f(x - ct) + 2g(x + ct) \\ &= \underbrace{f(x - ct) + g(x - ct)}_{\equiv \eta_0(x - ct)} + \underbrace{f(x + ct) + g(x + ct)}_{\equiv \eta_0(x + ct)} + \underbrace{f(x - ct) - f(x + ct) + g(x + ct) - g(x - ct)}_{\equiv \int_{x-ct}^{x+ct} ds [g'(s) - f'(s)]}\end{aligned}$$

Also

$$\eta(x, t) = \frac{1}{2}[\eta_0(x - ct) + \eta_0(x + ct) + \int_{x-ct}^{x+ct} ds \eta_1(s)] \quad (8.6)$$

Die letzte Gleichung stellt damit die allgemeine Lösung der eindimensionalen Wellengleichung für eine zur Zeit  $t = 0$  bekannte Anfangsauslenkung  $\eta_0(x)$  und Anfangsgeschwindigkeit  $c\eta_1(x)$  dar. Die Lösung heißt auch *Lösung von d'Alembert*<sup>4</sup>.

Es ist wichtig festzustellen, dass der Wert der Auslenkung  $\eta(x, t)$  am Ort  $x_0$  zur Zeit  $t_0$  von den Funktionen  $\eta_0(x)$  und  $\eta_1(x)$  ausschließlich für Werte im Intervall  $[x_0 - ct_0, x_0 + ct_0]$  beeinflusst wird!

Bei Vorgabe einer endlichen Länge  $L$  der Saite können sich die Enden nicht bewegen, da sie eingespannt sind. Dann ergeben sich zu jeder Zeit  $t$  an den Enden die Randbedingungen:

$$\eta(x = 0, t) = 0 = \eta(x = L, t).$$

Dies ermöglicht zu folgern:

1.

$$\begin{aligned}\eta(x = 0, t) &\stackrel{!}{=} 0 \\ &\Rightarrow f(-ct) + g(ct) = 0 \quad \forall t \\ &\Rightarrow g(s) = -f(-s) \\ &\Rightarrow \eta(x, t) = f(x - ct) - f(-x - ct)\end{aligned}$$

<sup>4</sup>Jean Baptiste le Rond d'Alembert, bedeutender französischer Mathematiker und Physiker des 18. Jahrhunderts.



$$\begin{aligned}\eta(x &= L, t) \stackrel{!}{=} 0 \\ \Rightarrow f(L - ct) - f(-L - ct) &= 0\end{aligned}$$

Hieraus sieht man sofort, dass die Funktion  $f(s)$  *periodisch* mit Periode  $2L$  ist:

$$f(s + 2L) = f(s)$$

Daraus ergibt sich für die Lösung der eingespannten Saite die Eigenschaft:

$$\begin{aligned}\eta\left(x, t + \frac{2L}{c}\right) &= f\left[x - c\left(t + \frac{2L}{c}\right)\right] - f\left[-x - c\left(t + \frac{2L}{c}\right)\right] \\ &= f(x - 2L - ct) - f(-x - 2L - ct) \\ &= f(x - ct) - f(-x - ct) \\ &= \eta(x, t)\end{aligned}$$

Damit ist die *Periode* der Schwingung ohne weitere Rechnung zu  $T = \frac{2L}{c}$  abzulesen!

Die abgeleiteten Eigenschaften legen es nahe, die Lösung  $\eta(x, t)$  des Problems der fest eingespannten Saite als Fourierreihe der Gestalt

$$\eta(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (8.7)$$

anzusetzen. Die Schwingungsmoden der eingespannten Saite mit allen entsprechenden Obertönen sind demnach sinusförmig. Die noch unbestimmten Koeffizienten  $a_n(t)$  bergen selbst noch eine Abhängigkeit von der Zeit, die man durch Einsetzen von  $\eta(x, t)$  in die Schwingungsdifferentialgleichung (8.5) leicht bestimmen kann:

$$\left[\frac{1}{c^2}\partial_t^2 + \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\right] a_n(t) = 0$$

Offensichtlich hat diese gewöhnliche Differentialgleichung die allgemeine Lösung

$$\begin{aligned}a_n(t) &= C_n \cos(\omega_n t) + S_n \sin(\omega_n t) \\ \omega_n &= \frac{c}{L} n\pi \\ n &= 1, 2, \dots,\end{aligned}$$

wobei  $C_n$  und  $S_n$  noch zu bestimmende Amplituden sind.

Aus den Anfangsbedingungen für den Zustand der Saite zur Zeit  $t = 0$ , also aus den vorgegebenen Profilen für die Anfangsauslenkung  $\eta_0(x)$  und Anfangsgeschwindigkeit  $c\eta_1(x)$ , lassen sich nun die Amplituden  $C_n$  und  $S_n$  wie folgt bestimmen:

$$\begin{aligned}\eta_0(x) &= [\eta(x, t)]_{t=0} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(0) \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \\ \eta_1(x) &= \left[\frac{1}{c}\partial_t\eta(x, t)\right]_{t=0} = \frac{1}{c} \sum_{n=1}^{\infty} \dot{a}_n(0) \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\omega_n}{c}\right) S_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\end{aligned}$$

Es folgt nach Multiplikation mit  $\sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right)$  auf beiden Seiten:

$$\begin{aligned}\eta_0(x) \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right) &= \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right) \\ \eta_1(x) \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right) &= \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\omega_n}{c}\right) S_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right)\end{aligned}$$

Integration über  $x$  von 0 bis  $L$  liefert schließlich unter Ausnutzung der Orthogonalitätsrelation für die Sinusfunktion,

$$\frac{2}{L} \int_0^L dx' \sin\left(\frac{n\pi}{L}x'\right) \cdot \sin\left(\frac{m\pi}{L}x'\right) = \delta_{n,m},$$

für die Amplituden  $C_m$  und  $S_m$  das Resultat:

$$\begin{aligned}C_m &= \frac{2}{L} \int_0^L dx' \sin\left(\frac{m\pi}{L}x'\right) \eta_0(x') \\ S_m &= \left(\frac{c}{\omega_m}\right) \cdot \frac{2}{L} \int_0^L dx' \sin\left(\frac{m\pi}{L}x'\right) \eta_1(x')\end{aligned}$$

Damit ist die Lösung der eingespannten Saite als Fourierreihe (8.7) vollständig bestimmt! In der Praxis mag es nicht immer gelingen, die Fourierkoeffizienten  $C_m$  und  $S_m$  analytisch zu berechnen. Man kann die betreffenden Integrale aber jedenfalls numerisch berechnen. Damit ist die Funktion  $a_n(t)$  bestimmt und die Auslenkung  $\eta(x, t)$  kann aus (8.7) als Fourierreihe berechnet werden.

### 8.4.2 Geteilte Saite mit unstetiger Massebelegung

Als nächstes betrachten wir eine unendlich lange (gespannte) Saite<sup>5</sup>. Infolge eines Sprungs der Massebelegung  $\mu(x)$  an der Stelle  $x = 0$  ist die Ausbreitungsgeschwindigkeit  $c(x)$  für die auf der Saite propagierenden Signale zweigeteilt:

$$c(x) = \begin{cases} c_1, & x < 0 \\ c_2, & x \geq 0 \end{cases}$$

Wir betrachten jetzt ein von links nach rechts propagierendes Signal  $\eta_0(x - c_1t)$ . Die Lösung  $\eta(x, t)$  der 1D-Wellengleichung ist dann wegen des Sprungs der Schallgeschwindigkeit bei  $x = 0$  von der Gestalt

$$\eta(x, t) = \begin{cases} \eta_0(x - c_1t) + \eta_R(x + c_1t), & x < 0 \\ \eta_T(x - c_2t), & x > 0 \end{cases}$$

Hier beschreibt  $\eta_R$  das bei  $x = 0$  reflektierte Signal, und  $\eta_T$  beschreibt das transmittierte Signal. Als Lösung der Wellengleichung ( $D = 1$ ) müssen beide Funktionen,  $\eta(x, t)$  und die erste Ableitung  $\partial_x \eta(x, t)$ , bei  $x = 0$  stetig sein:

$$\eta_0(-c_1t) + \eta_R(c_1t) = \eta_T(-c_2t)$$

Unter Verwendung der für Funktionen  $F = F(x \pm c_jt)$  gültigen Relation

$$\partial_x F(x \pm c_jt) = \pm \frac{1}{c_j} \partial_t F(x \pm c_jt)$$

<sup>5</sup>Es soll betont werden, dass dieser Abschnitt vollkommen ohne die Betrachtung von „Wellen“ auskommt.

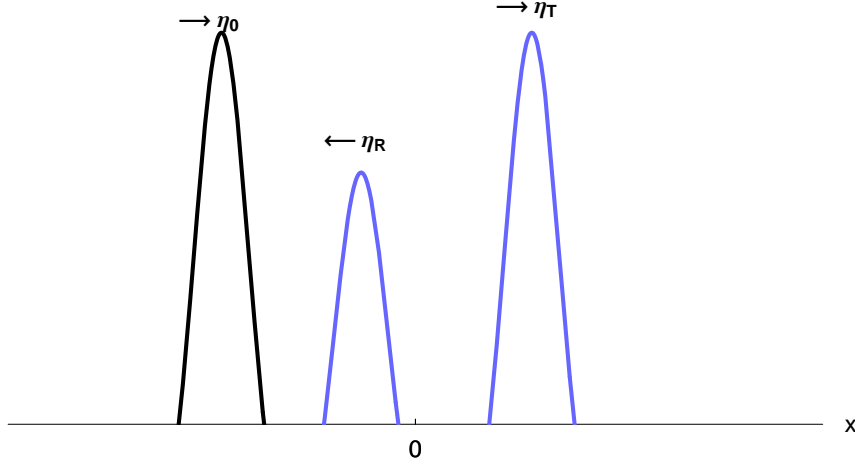


Abbildung 8.5: Geteilte Saite mit transmittierten und reflektierten Signalen

folgt dann aus der Bedingung der Stetigkeit der ersten Ableitung bei  $x = 0$ :

$$-\frac{1}{c_1} \partial_t \eta_0(-c_1 t) + \frac{1}{c_1} \partial_t \eta_R(c_1 t) = -\frac{1}{c_2} \partial_t \eta_T(-c_2 t)$$

Integration bezüglich der Zeit  $t$  ergibt sofort (bis auf eine Integrationskonstante  $k_0$ )

$$-\frac{1}{c_1} \eta_0(-c_1 t) + \frac{1}{c_1} \eta_R(c_1 t) = -\frac{1}{c_2} \eta_T(-c_2 t) + k_0$$

Das einlaufende Signal  $\eta_0(x)$  ist laut Voraussetzung zur Anfangszeit  $t = 0$  lokalisiert, also gleich Null für  $x \notin [x_0 - w, x_0 + w]$ . Dann kann man für  $x_0 + w \ll 0$  die Konstante  $k_0 = 0$  setzen, da auf der Saite weder  $\eta_T$  noch  $\eta_R$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  existieren.

Nach dem Gesagten erhalten wir für alle Zeiten  $t > 0$  jetzt die beiden Gleichungen:

$$\eta_0(-c_1 t) + \eta_R(c_1 t) = \eta_T(-c_2 t) \quad (8.8)$$

$$-\frac{1}{c_1} \eta_0(-c_1 t) + \frac{1}{c_1} \eta_R(c_1 t) = -\frac{1}{c_2} \eta_T(-c_2 t) \quad (8.9)$$

Aus (8.8) und (8.9) folgt sofort:

$$\begin{aligned} \eta_T(-c_2 t) &= \frac{2c_2}{c_2 + c_1} \eta_0(-c_1 t) \\ \eta_R(c_1 t) &= \frac{c_2 - c_1}{c_2 + c_1} \eta_0(-c_1 t) \end{aligned}$$

Die gesuchten Funktionen  $\eta_T(x - c_2 t)$  bzw.  $\eta_R(x + c_1 t)$  erhält man schließlich durch einen geeigneten Shift der Zeitvariablen, d.h.  $t \rightarrow t - \frac{x}{c_2}$  bzw.  $t \rightarrow t + \frac{x}{c_1}$ :

$$\begin{aligned} \eta_T(x - c_2 t) &= \eta_T \left[ -c_2 \left( t - \frac{x}{c_2} \right) \right] = \frac{2c_2}{c_2 + c_1} \eta_0 \left[ -c_1 \left( t - \frac{x}{c_2} \right) \right] \\ \eta_R(x + c_1 t) &= \eta_R \left[ c_1 \left( t + \frac{x}{c_1} \right) \right] = \frac{c_2 - c_1}{c_2 + c_1} \eta_0 \left[ -c_1 \left( t + \frac{x}{c_1} \right) \right] \end{aligned}$$

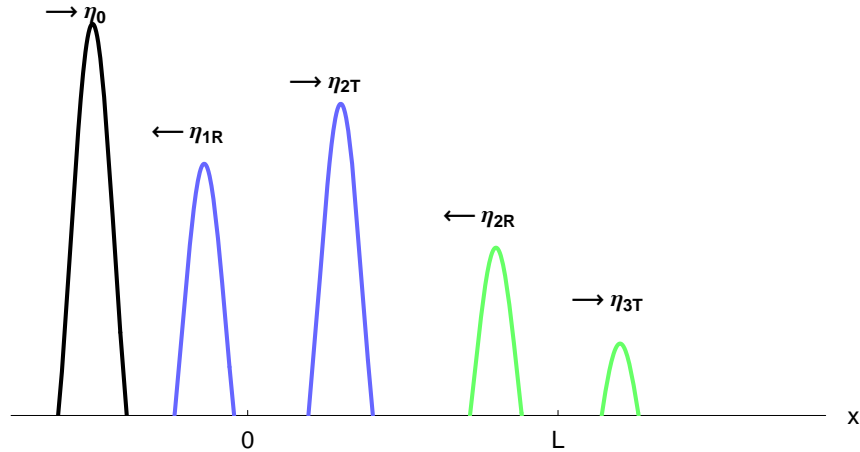


Abbildung 8.6: Geschichtetes Medium mit reflektierten und transmittierten Signalen

Die gesuchte Lösung der 1D-Wellengleichung ist demnach

$$\eta(x, t) = \begin{cases} \eta_0(x - c_1 t) + \frac{c_2 - c_1}{c_2 + c_1} \eta_0(-x - c_1 t) \\ \frac{2c_2}{c_1 + c_2} \eta_0 \left[ \frac{c_1}{c_2} (x - c_2 t) \right] \end{cases}$$

Das reflektierte Signal  $\eta_R(x + c_1 t)$  hat dieselbe Gestalt wie das einlaufende Signal  $\eta_0(x - c_1 t)$ . Diese Eigenschaft nennt man Forminvarianz. Die Amplituden von  $\eta_R$  und  $\eta_T$  sind nur durch das Verhältnis der Ausbreitungsgeschwindigkeiten  $c_1$  und  $c_2$  bestimmt.

Für  $c_1 \gg c_2$  wird die Amplitude des transmittierten Signals sehr klein. Diesen Umstand bezeichnet man als Impedanzfehlanpassung<sup>6</sup>. Das reflektierte Signal hat in dem Fall im Wesentlichen dieselbe Amplitude, aber das Vorzeichen ist entgegengesetzt zum einlaufenden Signal.

Für  $c_2 \gg c_1$  hat das reflektierte Signal das gleiche Vorzeichen wie das einlaufende Signal, während das transmittierte Signal eine doppelt so große Amplitude bekommt!

Hervorzuheben ist, dass die explizite Betrachtung von harmonischen Wellen an keinem Punkt der Überlegungen nötig war, um zu den erhaltenen Ergebnisse zu gelangen.

### 8.4.3 Ausbreitung elastischer Wellen im dreifach geschichtetem Medium

Wir betrachten jetzt ein in drei Abschnitte  $x < 0$ ,  $0 < x < L$  und  $L < x$  unterteiltes stratifiziertes Medium mit stückweise konstanter Ausbreitungsgeschwindigkeit

$$c(x) = \begin{cases} c_1 & x < 0 \\ c_2 & 0 < x < L \\ c_3 & L < x \end{cases}$$

<sup>6</sup>Dieser Effekt tritt zum Beispiel beim Schall an der Grenzfläche von Wasser zu Luft auf. Der Grund dafür sind die stark verschiedenen Ausbreitungsgeschwindigkeiten von Schall in Wasser und Luft.

Die Lösung  $\eta(x, t)$  der betreffenden 1D-Wellengleichung

$$\left[ \frac{1}{c(x)^2} \partial_t^2 - \partial_x^2 \right] \eta(x, t) = 0$$

spielt in technischen Anwendungen der Physik propagierender Wellen eine bedeutende Rolle. Wir setzen jetzt die allgemeine Lösung in der Form

$$\eta(x, t) = \begin{cases} \eta_0(x - c_1 t) + \eta_{1,R}(x + c_1 t) & x < 0 \\ \eta_{2,T}(x - c_2 t) + \eta_{2,R}(x + c_2 t) & 0 < x < L \\ \eta_{3,T}(x - c_3 t) & L < x \end{cases}$$

an.

Die gesuchte Funktion  $\eta(x, t)$  und ihre erste Ableitung  $\partial_x \eta(x, t)$  sind insbesondere an den Stellen  $x = 0$  und  $x = L$  stetig. In jeder der drei Schichten hängt die Funktion  $\eta(x, t)$  als Lösung der 1D-Wellengleichung von der Kombination  $x \pm c_j t$  ab. Die Ortsableitung so einer Funktion ist immer proportional zur Zeitableitung (für  $j = 0, 1, 2$ ):

$$\partial_x F(x \pm c_j t) = \pm \frac{1}{c_j} \partial_t F(x \pm c_j t)$$

Aus den Anschlussbedingungen bei  $x = 0$  und  $x = L$  ergeben sich 4 Gleichungen für 4 Unbekannte Funktionen  $\eta_{1,R}$ ,  $\eta_{2,T}$ ,  $\eta_{2,R}$  und  $\eta_{3,T}$ :

$$\eta_0(-c_1 t) + \eta_{1,R}(c_1 t) = \eta_{2,T}(-c_2 t) + \eta_{2,R}(c_2 t) \quad (8.10)$$

$$\eta_{2,T}(L - c_2 t) + \eta_{2,R}(L + c_2 t) = \eta_{3,T}(L - c_3 t) \quad (8.11)$$

$$-\frac{1}{c_1} \partial_t \eta_0(-c_1 t) + \frac{1}{c_1} \partial_t \eta_{1,R}(c_1 t) = -\frac{1}{c_2} \partial_t \eta_{2,T}(-c_2 t) + \frac{1}{c_2} \partial_t \eta_{2,R}(c_2 t) \quad (8.12)$$

$$-\frac{1}{c_2} \partial_t \eta_{2,T}(L - c_2 t) + \frac{1}{c_2} \partial_t \eta_{2,R}(L + c_2 t) = -\frac{1}{c_3} \partial_t \eta_{3,T}(L - c_3 t) \quad (8.13)$$

Das einlaufende Signal  $\eta_0(x, t)$  sei zur Zeit  $t = 0$  an der Stelle  $x = x_0$  zentriert und im Intervall  $x_0 - w \leq x \leq x_0 + w$  lokalisiert. Es soll also für  $t = 0$  gelten:

$$\begin{array}{ll} \eta_0(x) = 0 & x \notin [x_0 - w, x_0 + w] \\ \eta_{1,R}(x) = 0 & x < 0 \\ \eta_{2,T}(x) = 0 & 0 < x < L \\ \eta_{2,R}(x) = 0 & 0 < x < L \\ \eta_{3,T}(x) = 0 & L < x \end{array}$$

Die Gleichungen (8.12) und (8.13) ergeben somit nach Integration über die Zeit von  $t' = 0$  bis  $t' = t$

$$-\frac{1}{c_1} \eta_0(-c_1 t) + \frac{1}{c_1} \eta_{1,R}(c_1 t) = -\frac{1}{c_2} \eta_{2,T}(-c_2 t) + \frac{1}{c_2} \eta_{2,R}(c_2 t) \quad (8.14)$$

$$-\frac{1}{c_2} \eta_{2,T}(L - c_2 t) + \frac{1}{c_2} \eta_{2,R}(L + c_2 t) = -\frac{1}{c_3} \eta_{3,T}(L - c_3 t) \quad (8.15)$$

Zusammenfassend gilt nach dem Gesagten für alle Zeiten  $t > 0$  :

$$\eta_0(-c_1 t) + \eta_{1,R}(c_1 t) = \eta_{2,T}(-c_2 t) + \eta_{2,R}(c_2 t) \quad (8.16)$$

$$-\eta_0(-c_1 t) + \eta_{1,R}(c_1 t) = -\frac{c_1}{c_2} \eta_{2,T}(-c_2 t) + \frac{c_1}{c_2} \eta_{2,R}(c_2 t) \quad (8.17)$$

$$\eta_{2,T}(L - c_2 t) + \eta_{2,R}(L + c_2 t) = \eta_{3,T}(L - c_3 t) \quad (8.18)$$

$$-\frac{c_3}{c_2} \eta_{2,T}(L - c_2 t) + \frac{c_3}{c_2} \eta_{2,R}(L + c_2 t) = -\eta_{3,T}(L - c_3 t) \quad (8.19)$$

Subtraktion von (8.16) und (8.17) ergibt:

$$\left(1 + \frac{c_1}{c_2}\right) \eta_{2,T}(-c_2 t) + \left(1 - \frac{c_1}{c_2}\right) \eta_{2,R}(c_2 t) = 2 \cdot \eta_0(-c_1 t)$$

Addition von (8.18) und (8.19) ergibt:

$$\left(1 - \frac{c_3}{c_2}\right) \eta_{2,T}(L - c_2 t) + \left(1 + \frac{c_3}{c_2}\right) \eta_{2,R}(L + c_2 t) = 0$$

Um die Funktionswerte

$$\eta_{2,T}(L - c_2 t) \quad \text{und} \quad \eta_{2,R}(L + c_2 t)$$

mit den entsprechenden Werten

$$\eta_{2,T}(-c_2 t) \quad \text{und} \quad \eta_{2,R}(c_2 t)$$

verknüpfen zu können, bedienen wir uns einer (formalen) Taylorentwicklung:

$$F(h + s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{h^n}{n!} \partial_s^n F(s)$$

Die auftretende Potenzreihe entspricht formal derjenigen der Exponentialfunktion:

$$\exp(h \partial_s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{h^n}{n!} \partial_s^n$$

Der so definierte Operator ist der Shift-Operator<sup>7</sup>. Es gilt für unendlich oft differenzierbare Funktionen:

$$F(h + s) = \exp(h \partial_s) \circ F(s)$$

Dieser technische Trick erlaubt eine (formale) Lösung des Problems:

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{L}{c_2} \partial_t\right) \circ \eta_{2,T}(-c_2 t) &= \eta_{2,T}\left[-c_2 \left(t - \frac{L}{c_2}\right)\right] = \eta_{2,T}(L - c_2 t) \\ \exp\left[\frac{L}{c_2} \partial_t\right] \circ \eta_{2,R}(c_2 t) &= \eta_{2,R}\left[c_2 \left(t + \frac{L}{c_2}\right)\right] = \eta_{2,R}(L + c_2 t) \end{aligned}$$

<sup>7</sup>Der Shiftoperator hat folgende Eigenschaften:

$$\begin{aligned} \exp(-h \partial_s) \exp(h \partial_s) &= \mathbf{1} \\ \exp(-h \partial_s) \exp(-h \partial_s) &= \exp(-2h \partial_s) \\ \exp(-h \partial_s)^n &= \exp(-nh \partial_s) \end{aligned}$$

Es folgt aus (8.4.3)

$$\left(1 - \frac{c_3}{c_2}\right) \exp\left(-\frac{L}{c_2} \partial_t\right) \cdot \eta_{2,T}(-c_2 t) + \left(1 + \frac{c_3}{c_2}\right) \exp\left[\frac{L}{c_2} \partial_t\right] \cdot \eta_{2,R}(c_2 t) = 0$$

Multiplizieren von (8.4.3) mit  $\left(1 + \frac{c_3}{c_2}\right)$  und von (8.4.3) mit  $-\left(1 - \frac{c_1}{c_2}\right) \cdot \exp\left[-\frac{L}{c_2} \partial_t\right]$  ergibt

$$\left(1 + \frac{c_3}{c_2}\right) \left(1 + \frac{c_1}{c_2}\right) \eta_{2,T}(-c_2 t) + \left(1 + \frac{c_3}{c_2}\right) \left(1 - \frac{c_1}{c_2}\right) \eta_{2,R}(c_2 t) = 2 \left(1 + \frac{c_3}{c_2}\right) \eta_0(-c_1 t) \quad (8.20)$$

$$-\left(1 - \frac{c_1}{c_2}\right) \left(1 - \frac{c_3}{c_2}\right) \exp\left[-\frac{2L}{c_2} \partial_t\right] \cdot \eta_{2,T}(-c_2 t) - \left(1 - \frac{c_1}{c_2}\right) \left(1 + \frac{c_3}{c_2}\right) \eta_{2,R}(c_2 t) = 0 \quad (8.21)$$

Addition von (8.20) und (8.21) ergibt eine Differenzgleichung für die unbekannte Funktion  $\eta_{2,T}$

$$\left[\left(1 + \frac{c_3}{c_2}\right) \left(1 + \frac{c_1}{c_2}\right) \cdot \hat{\mathbf{1}} - \left(1 - \frac{c_1}{c_2}\right) \left(1 - \frac{c_3}{c_2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{2L}{c_2} \partial_t\right)\right] \cdot \eta_{2,T}(-c_2 t) = 2 \left(1 + \frac{c_3}{c_2}\right) \eta_0(-c_1 t)$$

Anwenden des inversen Operator  $[\dots]^{-1}$  ergibt dann die (formale) Lösung:

$$\eta_{2,T}(-c_2 t) = \frac{2 \left(1 + \frac{c_3}{c_2}\right) \cdot \hat{\mathbf{1}}}{\left(1 + \frac{c_3}{c_2}\right) \left(1 + \frac{c_1}{c_2}\right) \hat{\mathbf{1}} - \left(1 - \frac{c_1}{c_2}\right) \left(1 - \frac{c_3}{c_2}\right) \exp\left(-\frac{2L}{c_2} \partial_t\right)} \cdot \eta_0(-c_1 t)$$

Durch Umstellen erreicht man folgende Darstellung der Lösung

$$\eta_{2,T}(-c_2 t) = \frac{2}{1 + \frac{c_1}{c_2}} \frac{\hat{\mathbf{1}}}{\hat{\mathbf{1}} - \frac{(1 - \frac{c_1}{c_2})(1 - \frac{c_3}{c_2})}{(1 + \frac{c_1}{c_2})(1 + \frac{c_3}{c_2})} \exp\left(-\frac{2L}{c_2} \partial_t\right)} \eta_0(-c_1 t)$$

Mit Hilfe der geometrischen Reihe für einen linearen Operator

$$\frac{\hat{\mathbf{1}}}{\hat{\mathbf{1}} - \hat{L}_{op}} = 1 + \hat{L}_{op} + \hat{L}_{op}^2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} (\hat{L}_{op})^n \quad (8.22)$$

erhalten wir die gesuchte Lösung:

$$\begin{aligned} \eta_{2,T}(-c_2 t) &= \frac{2}{1 + \frac{c_1}{c_2}} \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \frac{(1 - \frac{c_1}{c_2})(1 - \frac{c_3}{c_2})}{(1 + \frac{c_1}{c_2})(1 + \frac{c_3}{c_2})} \right]^n \left[ \exp\left(-\frac{2L}{c_2} \partial_t\right) \right]^n \eta_0(-c_1 t) \\ &= \frac{2}{1 + \frac{c_1}{c_2}} \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \frac{(1 - \frac{c_1}{c_2})(1 - \frac{c_3}{c_2})}{(1 + \frac{c_1}{c_2})(1 + \frac{c_3}{c_2})} \right]^n \eta_0 \left[ -c_1 \left( t - n \frac{2L}{c_2} \right) \right] \\ &= \frac{2}{1 + \frac{c_1}{c_2}} \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \frac{(1 - \frac{c_1}{c_2})(1 - \frac{c_3}{c_2})}{(1 + \frac{c_1}{c_2})(1 + \frac{c_3}{c_2})} \right]^n \eta_0 \left[ 2n L \frac{c_1}{c_2} - c_1 t \right] \end{aligned}$$

Die Konvergenz der Reihe ist gegeben, da

$$|q| = \left| \frac{(1 - \frac{c_1}{c_2})(1 - \frac{c_3}{c_2})}{(1 + \frac{c_1}{c_2})(1 + \frac{c_3}{c_2})} \right| < 1 \quad (8.23)$$

Die Lösung  $\eta_{2,T}(-c_2t)$  ist eine Reihe bestehend aus den geschifteten Werten des einlaufenden Signals mit den entsprechenden, durch die Ordnung der Mehrfachreflexion bestimmten Gewichtsfaktoren  $q^n$ , die nur von den Verhältnissen der jeweiligen Ausbreitungsgeschwindigkeiten  $c_1, c_2, c_3$  abhängen.

Eine Abschätzung der Anzahl der Summanden in der Reihe für ein lokalisiertes Signal ergibt sich aus dem Umstand, dass das einlaufende Signal  $\eta_0(s)$  nur im Intervall  $x_0 - w < s < x_0 + w$  von Null verschieden ist. Also

$$\begin{aligned} x_0 - w < 2nL \frac{c_1}{c_2} - c_1t < x_0 + w \\ \Rightarrow \frac{x_0 - w + c_1t}{2L \cdot \frac{c_1}{c_2}} < n < \frac{x_0 + w + c_1t}{2L \frac{c_1}{c_2}} \end{aligned}$$

Da  $\eta_{2,T}$  nunmehr berechnet ist, ergeben sich die übrigen reflektierten bzw. transmittierten Signale hieraus zu

$$\begin{aligned} \eta_{2,R}(c_2t) &= -\frac{1 - \frac{c_3}{c_2}}{1 + \frac{c_3}{c_2}} \exp\left(-\frac{2L}{c_2} \partial_t\right) \eta_{2,T}(-c_2t) \\ &= -\frac{1 - \frac{c_3}{c_2}}{1 + \frac{c_3}{c_2}} \eta_{2,T} \left[ -c_2 \left( t - \frac{2L}{c_2} \right) \right] \\ &= -\frac{1 - \frac{c_3}{c_2}}{1 + \frac{c_3}{c_2}} \eta_{2,T} (2L - c_2t), \end{aligned}$$

und dann:

$$\begin{aligned} \eta_{1,R}(c_1t) &= -\eta_0(-c_1t) + \eta_{2,T}(-c_2t) + \eta_{2,R}(c_2t) \\ \eta_{3,T}(L - c_3t) &= \eta_{2,T}(L - c_2t) + \eta_{2,R}(L + c_2t) \end{aligned}$$

Da die hergeleiteten Ausdrücke für alle Zeiten  $t$  gelten, ergeben sich hieraus die gesuchten Lösungen zu

$$\begin{aligned} \eta_{2,T}(x - c_2t) &= \eta_{2,T} \left[ -c_2 \left( t - \frac{x}{c_2} \right) \right] = \frac{2}{1 + \frac{c_1}{c_2}} \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \frac{(1 - \frac{c_1}{c_2})(1 - \frac{c_3}{c_2})}{(1 + \frac{c_1}{c_2})(1 + \frac{c_3}{c_2})} \right]^n \eta_0 \left[ 2nL \frac{c_1}{c_2} - c_1 \left( t - \frac{x}{c_2} \right) \right] \\ \eta_{2,R}(x + c_2t) &= \eta_{2,R} \left[ c_2 \left( t + \frac{x}{c_2} \right) \right] = -\frac{1 - \frac{c_3}{c_2}}{1 + \frac{c_3}{c_2}} \eta_{2,T} \left[ 2L - c_2 \left( t + \frac{x}{c_2} \right) \right] = -\frac{1 - \frac{c_3}{c_2}}{1 + \frac{c_3}{c_2}} \eta_{2,T} (2L - x - c_2t) \\ \eta_{1,R}(x + c_1t) &= \eta_{1,R} \left[ c_1 \left( t + \frac{x}{c_1} \right) \right] = -\eta_0 \left[ -c_1 \left( t + \frac{x}{c_1} \right) \right] + \eta_{2,T} \left[ -c_2 \left( t + \frac{x}{c_1} \right) \right] + \eta_{2,R} \left[ c_2 \left( t + \frac{x}{c_1} \right) \right] \\ \eta_{3,T}(x - c_3t) &= \eta_{3,T} \left[ L - c_3 \left( t - \frac{x - L}{c_3} \right) \right] = \eta_{2,T} \left[ L - c_2 \left( t - \frac{x - L}{c_3} \right) \right] + \eta_{2,R} \left[ L + c_2 \left( t - \frac{x - L}{c_3} \right) \right] \end{aligned}$$

Die Abbildung 8.7 verdeutlicht, wie ein einlaufender Puls durch Mehrfachreflexion an beiden Grenzflächen der Zwischenschicht entsprechend verändert in das Gebiet  $x > L$  ausläuft.

Abbildung 8.7:



### 8.4.4 Perfekte Transmission in dünner Schicht

Für den Spezialfall eines einlaufenden Signals  $\eta_0(x - c_1t)$  in Gestalt einer ebenen harmonischen Welle mit Amplitude 'Eins' erwartet man aufgrund der vorher angestellten Betrachtungen die folgende Form des Signals am Ort  $x$  zu der Zeit  $t$  :

$$\eta(x, t) = \begin{cases} e^{ik_1(x-c_1t)} + B_1e^{-ik_1(x+c_1t)} & \text{für } x < 0 \\ A_2e^{ik_2(x-c_2t)} + B_2e^{-ik_2(x+c_2t)} & \text{für } 0 < x < L \\ A_3e^{ik_3(x-c_3t)} & \text{für } L < x \end{cases}$$

Hier sind  $k_j = \frac{2\pi}{\lambda_j} = \frac{\omega}{c_j}$  die entsprechenden Wellenzahlen in den drei Gebieten. Wir stellen nun die Frage, welche Bedingung an die Dicke  $L$  der Zwischenschicht gestellt werden muss, so dass für die betrachtete Frequenz  $\omega = 2\pi f = k_1c_1 = k_2c_2 = k_3c_3$  der Reflektionskoeffizient für ein von links einlaufendes Signal verschwindet, also  $B_1 = 0$  ist. In dem Fall läge also perfekte Transmission durch die Zwischenschicht vor.

Die Stetigkeit von  $\eta(x, t)$  und  $\partial_x\eta(x, t)$  für  $x = 0$  und  $x = L$  liefert mit  $B_1 = 0$  nun vier Gleichungen für die Unbekannten  $A_2, B_2, A_3$  und  $L$ .

$$\begin{aligned} A_2 + B_2 &= 1 \\ A_2 - B_2 &= \frac{k_1}{k_2} \\ A_2e^{ik_2L} + B_2e^{-ik_2L} &= A_3e^{ik_3L} \\ A_2e^{ik_2L} - B_2e^{-ik_2L} &= \frac{k_3}{k_2}A_3e^{ik_3L} \end{aligned}$$

Aus den beiden ersten Gleichungen folgt sofort

$$\begin{aligned} A_2 &= \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{k_1}{k_2} \right) = \frac{c_1 + c_2}{2c_1} \\ B_2 &= \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{k_1}{k_2} \right) = \frac{c_1 - c_2}{2c_1} \end{aligned}$$

Der Quotient der beiden anderen Gleichungen ergibt:

$$\frac{A_2e^{ik_2L} + B_2e^{-ik_2L}}{A_2e^{ik_2L} - B_2e^{-ik_2L}} = \frac{A_3e^{ik_3L}}{\frac{k_3}{k_2}A_3e^{ik_3L}} = \frac{k_2}{k_3} = \frac{c_3}{c_2}$$

Somit

$$\frac{c_3}{c_2} = \frac{\frac{A_2}{B_2}e^{2ik_2L} + 1}{\frac{A_2}{B_2}e^{2ik_2L} - 1} = \frac{\frac{c_1+c_2}{c_1-c_2}e^{2ik_2L} + 1}{\frac{c_1+c_2}{c_1-c_2}e^{2ik_2L} - 1}$$

Auflösen nach  $e^{2ik_2L}$  liefert:

$$e^{2ik_2L} = \frac{c_3 + c_2}{c_3 - c_2} \frac{c_1 - c_2}{c_1 + c_2}$$

Da die rechte Seite eine reelle Zahl ist, gilt notwendig

$$2k_2L = n\pi \quad (\text{perfekte Impedananzanpassung})$$

Dies ist zugleich eine Bedingung an die Ausbreitungsgeschwindigkeit  $c_2$  in der Zwischenschicht. Sei zunächst angenommen  $n = 1$ , also  $k_2L = \frac{\pi}{2}$ . In dem Fall hat die Dicke  $L$  der Zwischenschicht

den kleinst möglichen von Null verschiedenen Wert. Es folgt für  $c_2$  die Bestimmungsgleichung:

$$\begin{aligned} \frac{c_3 + c_2}{c_3 - c_2} \frac{c_1 - c_2}{c_1 + c_2} &= e^{i\pi} = -1 \\ c_2 &= \sqrt{c_1 c_3} \end{aligned}$$

Mit  $k_2 = \frac{2\pi}{\lambda_2}$  berechnen wir:

$$L = \frac{\pi}{2k_2} = \frac{\pi}{2 \cdot \frac{2\pi}{\lambda_2}} = \frac{\lambda_2}{4}$$

Diese Beobachtung hat praktische Bedeutung, z.B. in der Wellenoptik für die Entspiegelung von Brillengläsern. Auch die Schallgeschwindigkeit eines Transducer-Gels bei der Ultraschalluntersuchung in der Medizin stellt im Wesentlichen das geometrische Mittel zwischen der Schallgeschwindigkeit von Wasser (weil der Körper zum größten Teil aus Wasser besteht) und der Schallgeschwindigkeit des Materials des Kopfes des Ultraschallgerätes dar, um eine gute Transmission der Ultraschallwellen zu gewährleisten.

## 8.5 Zweidimensionale Wellengleichung: Schwingungsmoden der rechteckigen Membran

Wir untersuchen die möglichen Schwingungsmoden einer eingespannten Membran mit einer konstanten Massenbelegung  $\mu = \frac{\text{Masse}}{\text{Fläche}}$ . Sei  $\mathbf{r} = (x, y, 0)$  ein materieller Punkt der Membran im ungespannten Zustand ist, und sei  $\partial_t \eta(\mathbf{r}, t)$  die Geschwindigkeit der Auslenkung der Membran in  $z$ -Richtung. Die kinetische Energie ergibt sich für kleine Geschwindigkeiten als Integral über die Fläche  $\mathbb{F}$  der Membran zu

$$K = \frac{\mu}{2} \int_{\mathbb{F}} d^2 r \partial_t \eta(\mathbf{r}, t) \partial_t \eta(\mathbf{r}, t)$$

Die Spannung der Membran  $\tau = \frac{\text{Kraft}}{\text{Länge}}$  ist ein weiterer charakteristischer Parameter. Das Verhältnis  $c = \sqrt{\frac{\tau}{\mu}}$  legt, wie wir gleich sehen werden, die Ausbreitungsgeschwindigkeit einer Störung auf der Membran fest. Wird die Membran gespannt, so treten Dehnungen und damit rückstellende Kräfte im Material auf. Ein materieller Punkt  $\mathbf{r}_j = (x_j, y_j, 0)$  im ungespannten Zustand verschiebt sich unter dem Einfluß der Spannung um  $\nabla \eta$ . Die potentielle Energie  $V$  ist dann die Summe über verspannte Flächenelemente  $df(\mathbf{r}_j)$  der Membran:

$$\begin{aligned} df(\mathbf{r}_j) &= |d\mathbf{u}(\mathbf{r}_j) \wedge d\mathbf{v}(\mathbf{r}_j)| \\ d\mathbf{u}(\mathbf{r}_j) &= \left[ \mathbf{e}_1 + \frac{\partial \eta(\mathbf{r}, t)}{\partial x} \mathbf{e}_3 \right]_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_j} dx \\ d\mathbf{v}(\mathbf{r}_j) &= \left[ \mathbf{e}_2 + \frac{\partial \eta(\mathbf{r}, t)}{\partial y} \mathbf{e}_3 \right]_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_j} dy \\ V &= \tau \sum_{\mathbf{r}_j} df(\mathbf{r}_j) \end{aligned}$$

Ausrechnen des Vektorproduktes liefert:

$$d\mathbf{u}(\mathbf{r}_j) \wedge d\mathbf{v}(\mathbf{r}_j) = \left[ -\frac{\partial \eta(\mathbf{r}, t)}{\partial x} \mathbf{e}_1 - \frac{\partial \eta(\mathbf{r}, t)}{\partial y} \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3 \right]_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_j} dy dx$$

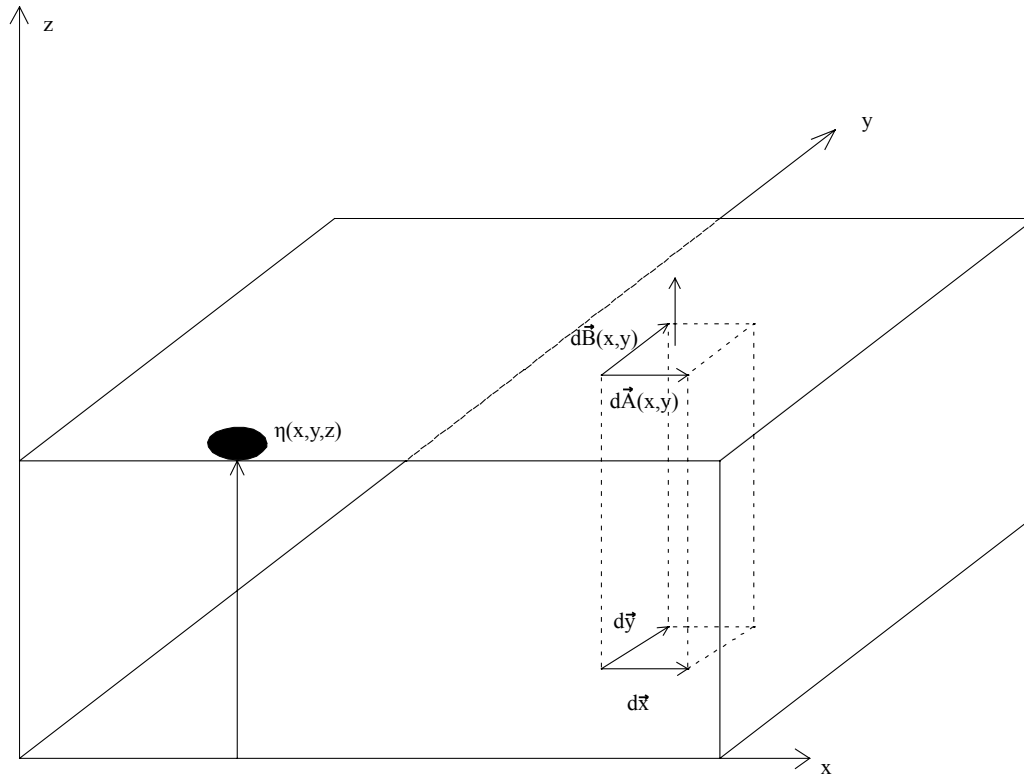


Abbildung 8.8: Skizze der Membran

Der Betrag dieses Vektorproduktes ist die Fläche des Parallelogramms, das von den Vektoren  $d\mathbf{u}(\mathbf{r}_j)$  und  $d\mathbf{v}(\mathbf{r}_j)$  aufgespannt wird:

$$|d\mathbf{u}(\mathbf{r}_j) \wedge d\mathbf{v}(\mathbf{r}_j)| = dx dy \sqrt{1 + \left(\frac{\partial \eta(\mathbf{r}, t)}{\partial x}\right)_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_j}^2 + \left(\frac{\partial \eta(\mathbf{r}, t)}{\partial y}\right)_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_j}^2}$$

Also folgt beim Übergang von der Summe zum Flächenintegral die potentielle Energie der deformierten Membran zu

$$\begin{aligned} V &= \tau \int_{\mathbb{F}} dx dy \sqrt{1 + \left(\frac{\partial \eta}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \eta}{\partial y}\right)^2} \\ &= \tau \int_{\mathbb{F}} dx dy \left[ 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \eta}{\partial x}\right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \eta}{\partial y}\right)^2 + o(|\nabla \eta|^4) \right] \\ &= V_0 + \frac{\tau}{2} \int_{\mathbb{F}} dx dy \left[ \left(\frac{\partial \eta}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \eta}{\partial y}\right)^2 \right] + o(|\nabla \eta|^4) \end{aligned}$$

Unter Weglassen der irrelevanten Konstanten  $V_0 = \tau \int_{\mathbb{F}} dx dy$  ergibt sich nach dem Gesagten die Lagrangedichte der eingespannten Membran zu

$$\mathcal{L}(\eta, \partial_t \eta, \partial_x \eta, \partial_y \eta) = \frac{\mu}{2} \partial_t \eta(\mathbf{r}, t) \partial_t \eta(\mathbf{r}, t) - \frac{\tau}{2} \left[ \left( \frac{\partial \eta(\mathbf{r}, t)}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial \eta(\mathbf{r}, t)}{\partial y} \right)^2 \right]$$

Die zugeordnete Lagrange-Bewegungsgleichung zur Bestimmung der möglichen Auslenkungen der Membran in vertikaler Richtung ist:

$$[\mu \partial_t^2 - \tau(\partial_x^2 + \partial_y^2)] \eta(\mathbf{r}, t) = 0$$

Mit  $c = \sqrt{\frac{\tau}{\mu}}$  als Ausbreitungsgeschwindigkeit für die elastischen Wellen der Membran ist dies die  $2D$ -Wellengleichung:

$$\left( \frac{1}{c^2} \partial_t^2 - \Delta \right) \eta(\mathbf{r}, t) = 0$$

Der Operator  $\Delta = \partial_x^2 + \partial_y^2$  ist der Laplace-Operator in  $D = 2$  räumlichen Dimensionen. Gesucht werden jetzt stehende Wellen, d.h. die möglichen Schwingungsmoden der eingespannten Membran. Zur Lösung der partiellen DGL separieren wir als erstes die Zeit  $t$  ab und machen den Separationsansatz:

$$\eta(\mathbf{r}, t) = f(t) \cdot W(\mathbf{r})$$

Hier ist  $f(t)$  eine nur von der Zeit  $t$  abhängige Funktion, während  $W(\mathbf{r})$  den Ortszustand der Membran beschreibt. Einsetzen des Ansatzes in die  $2D$ -Wellengleichung liefert

$$\frac{1}{c^2} \ddot{f}(t) \cdot W(\mathbf{r}) - f(t) \cdot \Delta W(\mathbf{r}) = 0$$

Es folgt dann:

$$\frac{\ddot{f}(t)}{f(t)} = c^2 \cdot \frac{\Delta W(\mathbf{r})}{W(\mathbf{r})}.$$

Die linke Seite hängt nur von der Zeit  $t$  ab, die rechte Seite nur vom Ort  $\mathbf{r}$ . Es muss dann eine Konstante, die wir als  $-\omega^2$  bezeichnen, geben, so dass für alle Zeiten  $t$  und alle Orte  $\mathbf{r} \in \mathbb{F}$  gilt:

$$\begin{aligned} \frac{\ddot{f}(t)}{f(t)} &= -\omega^2 \\ c^2 \frac{\Delta W(\mathbf{r})}{W(\mathbf{r})} &= -\omega^2 \end{aligned}$$

In anderen Worten: die Funktion  $f(t)$  genügt der gewöhnlichen DGL einer harmonischen Schwingung, während die Funktion  $W(\mathbf{r})$  Lösung der sog.  $2D$ -Helmholtz Gleichung ist:

$$\partial_t^2 f(t) + \omega^2 f(t) = 0 \tag{8.24}$$

$$\Delta W(\mathbf{r}) + k^2 W(\mathbf{r}) = 0 \tag{8.25}$$

wobei  $k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$ . Allerdings ist die Konstante  $-\omega^2$  noch unbestimmt und muss aus den Randbedingungen bestimmt werden.

Für eine reelle Konstante  $\omega$  ist  $f(t)$  eine harmonische Schwingung, i.A. mit einer von der Kreisfrequenz  $\omega$  abhängigen Amplitude  $a_\omega$  und Phase  $\beta_\omega$ :

$$f(t) = A_\omega \sin(\omega t + \beta_\omega)$$

Auf dem Rand  $\partial\mathbb{F}$  der Membran soll für alle Zeiten  $t$  gelten:  $\eta(\mathbf{r}_s, t) = 0$ , also  $W(\mathbf{r}_s) = 0$  für  $\mathbf{r}_s \in \partial\mathbb{F}$ . Um die Randbedingungen möglichst einfach zu formulieren, ist es geschickt, solche Koordinaten zu wählen, in denen die Randkurve  $\partial\mathbb{F}$  eine möglichst einfache Form hat. Eventuell kann man die Randkurve selbst zur Koordinatenlinie<sup>8</sup> machen. Dies ist für eine rechteckige Membran oder auch eine kreisförmige Membran ohne Weiteres möglich.

Im Folgenden sei eine rechteckige Membran betrachtet, die durch Geraden  $x = 0$ ,  $x = a$ ,  $y = 0$  und  $y = b$  begrenzt sei. Als geeignete Koordinaten bieten sich dann kartesische Koordinaten an. Dann erhält man (8.25) die Randbedingungen

$$W(x = 0, y) = W(x = a, y) = W(x, y = 0) = W(x, y = b) = 0$$

In einem zweiten Separationsansatz suchen wir die Funktion  $W(\mathbf{r})$  in der Form

$$W(x, y) = u(x) \cdot v(y)$$

Einsetzen in die Differentialgleichung und anschließende Division durch  $W(x, y)$  liefert

$$\frac{\partial_x^2 u(x)}{u(x)} + \frac{\partial_y^2 v(y)}{v(y)} + k^2 = 0$$

Der erste Term ist nicht von  $y$  abhängig, der zweite ist nicht von  $x$  abhängig. Die Summe der Terme kann nur für den Fall, dass die einzelnen Terme konstant sind, gleich  $-k^2$  sein. Es gibt demnach zwei Konstanten  $k_1^2$  und  $k_2^2$  mit

$$k_1^2 + k_2^2 = k^2$$

und

$$\frac{\partial_x^2 u(x)}{u(x)} = -k_1^2$$

$$\frac{\partial_y^2 v(y)}{v(y)} = -k_2^2$$

Also

$$\partial_x^2 u(x) + k_1^2 u(x) = 0$$

$$\partial_y^2 v(y) + k_2^2 v(y) = 0$$

Die Lösung dieser Gleichungen ist (bis auf willkürliche Amplituden):

$$u(x) = \sin(k_1 x + \alpha_1)$$

$$v(y) = \sin(k_2 y + \alpha_2)$$

Zur Erfüllung der Randbedingungen gilt notwendig

$$0 \stackrel{!}{=} W(x = a, y) = u(a) \cdot v(y) = \sin(\alpha_1) \cdot \sin(k_2 y + \alpha_2)$$

$$0 \stackrel{!}{=} W(x, y = 0) = u(x) \cdot v(0) = \sin(k_1 x + \alpha_1) \cdot \sin(\alpha_2)$$

Offensichtlich ist die Randbedingung auf den Linien  $x = 0$  bzw  $y = 0$  erfüllt, falls  $\alpha_1 = 0$  und  $\alpha_2 = 0$  gewählt ist. Also folgt

$$u(x) = \sin(k_1 x)$$

<sup>8</sup>Für rechteckige Membranen bieten sich kartesische Koordinaten an, für kreisrunde Membranen Polarkoordinaten, für elliptische Membranen [elliptische Koordinaten](#). Leider kann man nicht immer geeignete Koordinaten finden. Man ist dann auf numerische Verfahren zur Lösung der Helmholtz Gleichung angewiesen.

$$v(y) = \sin(k_2 y)$$

Um die Randbedingungen auf den Linien  $x = a$  bzw.  $y = b$  zu erfüllen, müssen  $k_1$  und  $k_2$  geeignet gewählt werden:

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} W(x = a, y) = u(a)v(y) = \sin(k_1 \cdot a) \sin(k_2 y) \\ 0 &\stackrel{!}{=} W(x, y = b) = u(x)v(b) = \sin(k_1 \cdot x) \sin(k_2 b) \end{aligned}$$

Dies impliziert

$$\begin{aligned} k_1 &= \frac{n_1 \pi}{a}, \quad n_1 \in \mathbb{N} \\ k_2 &= \frac{n_2 \pi}{b}, \quad n_2 \in \mathbb{N} \end{aligned}$$

Dann folgt wegen

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} = k_1^2 + k_2^2$$

sofort

$$\omega = \omega_{n_1, n_2} = c \cdot \sqrt{k_1^2 + k_2^2} = c\pi \sqrt{\left(\frac{n_1}{a}\right)^2 + \left(\frac{n_2}{b}\right)^2}$$

Die gesuchten stehenden Wellen einer am Rand fest eingespannten rechteckigen elastischen Membran haben somit die Gestalt:

$$\eta_{n_1, n_2}(x, y, t) = A_{n_1, n_2} \cdot \sin(\omega_{n_1, n_2} t + \beta_{n_1, n_2}) \cdot \sin\left(\frac{n_1 \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi}{b} y\right)$$

Für jedes Paar natürlicher Zahlen  $n_1, n_2 \in \mathbb{N}$  gibt es eine charakteristische Frequenz  $f = f_{n_1 n_2}$  der betreffenden Schwingungsmode:

$$f_{n_1 n_2} = \frac{\omega_{n_1, n_2}}{2\pi} = \frac{c}{2} \sqrt{\left(\frac{n_1}{a}\right)^2 + \left(\frac{n_2}{b}\right)^2}$$

Die Frequenz der Grundschiwingung ist

$$f_{1,1} = \frac{c}{2} \cdot \sqrt{\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2}},$$

für die Frequenzen der Oberschwingungen gilt

$$f_{n_1, n_2} = f_{1,1} \cdot \sqrt{\frac{(n_1 b)^2 + (n_2 a)^2}{a^2 + b^2}}.$$

Betrachtet man eine quadratische Membran, so ist  $b = a$  und damit

$$f_{n_1, n_2} = f_{1,1} \sqrt{\frac{n_1^2 + n_2^2}{2}},$$

man findet in dem Fall für  $n_1 = n_2$  tatsächlich *harmonische* Oberschwingungen der Grundfrequenz  $f_{n_1, n_2} = f_{1,1} \cdot a_1$ . Für  $n_1 \neq n_2$  haben die Oberschwingungen irrationale Verhältnisse zur Grundfrequenz, sind also nicht harmonisch. Die Eigenmoden  $\eta_{n_1, n_2}(x, y, t)$  und  $\eta_{n_2, n_1}(x, y, t)$  sind verschiedene stehende Wellen, aber ihre Eigenfrequenzen sind gleich:

$$f_{n_1, n_2} = f_{n_2, n_1}$$

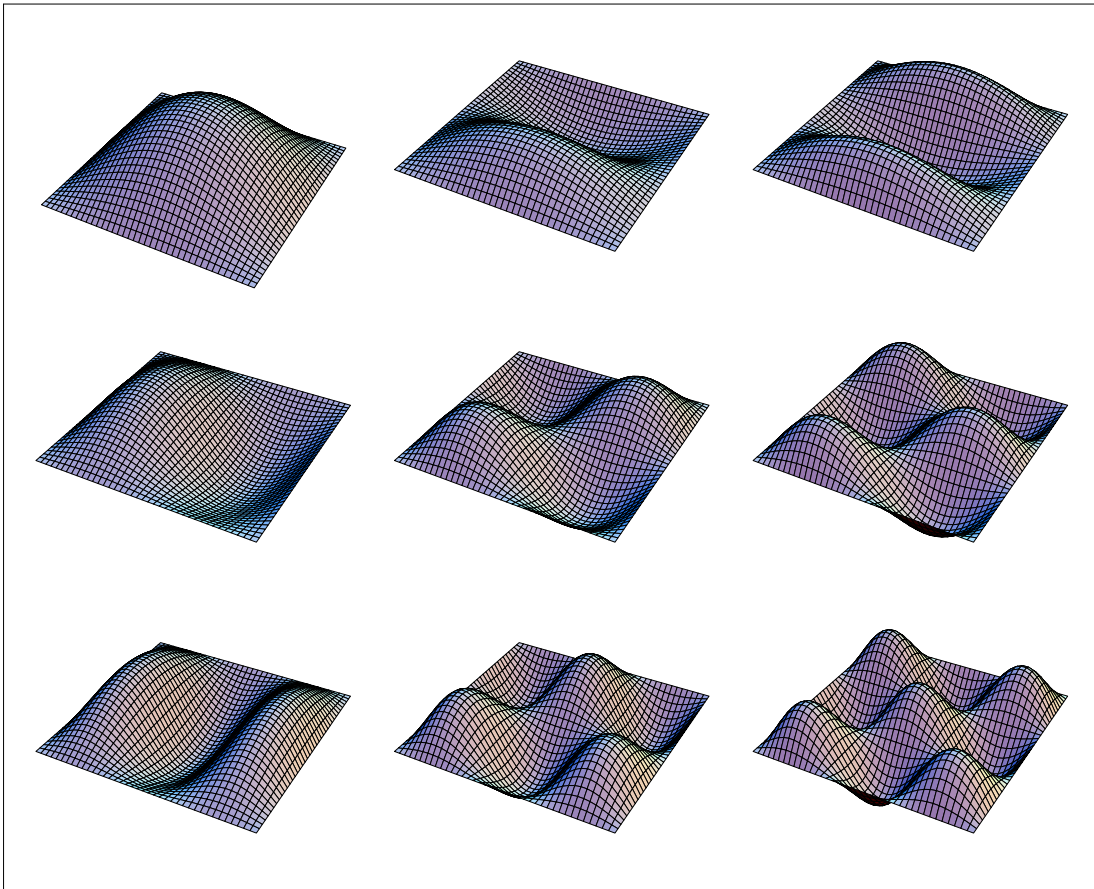


Abbildung 8.9: Moden der Membran als 3D-Ansicht

Diese Erscheinung nennt man *Entartung*. Im Falle der quadratischen Membran sind die Eigenmoden zweifach entartet. Für nichtquadratische Membranen mit  $a \neq b$  ist die Entartung aufgehoben. Die entarteten Lösungspaare  $\eta_{n_1, n_2}$  und  $\eta_{n_2, n_1}$  gehen durch Drehung der Membran um  $90^\circ$  ineinander über. Qualitatives Merkmal: je größer die Anzahl der Knoten ist, desto höher ist die Frequenz der Eigenschwingung.

Ein allgemeiner Schwingungszustand  $\eta(x, y, t)$  der Membran kann als Superposition aller charakteristischen Schwingungsmoden dargestellt werden:

$$\eta(x, y, t) = \sum_{n_1, n_2=1}^{\infty} A_{n_1, n_2} \sin(\omega_{n_1, n_2} t + \beta_{n_1, n_2}) \sin\left(\frac{n_1 \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi}{b} y\right)$$

Die Phasen  $\beta_{n_1, n_2}$  und die Amplituden  $A_{n_1, n_2}$  können so gewählt werden, dass bei  $t = 0$  die Anfangswerte

$$\begin{aligned} \eta(x, y, t = 0) &= \eta_0(x, y) \\ \left[ \frac{\partial}{\partial t} \eta(x, y, t) \right]_{t=0} &= \eta_1(x, y) \end{aligned}$$

für vorgegebene Profil-Funktionen  $\eta_0(x, y)$  und  $\eta_1(x, y)$  erfüllt werden! Dann folgt notwendig:

$$\begin{aligned} \eta_0(x, y) &= \sum_{n'_1, n'_2=1}^{\infty} A_{n'_1, n'_2} \sin(\beta_{n'_1, n'_2}) \cdot \sin\left(\frac{n'_1 \pi}{a} x\right) \cdot \sin\left(\frac{n'_2 \pi}{b} y\right) \\ \eta_1(x, y) &= \sum_{n'_1, n'_2=1}^{\infty} A_{n'_1, n'_2} \omega_{n'_1, n'_2} \cos(\beta_{n'_1, n'_2}) \sin\left(\frac{n'_1 \pi}{a} x\right) \cdot \sin\left(\frac{n'_2 \pi}{b} y\right) \end{aligned}$$

Aus den obigen Gleichungen ergeben sich wieder Fourierreihen (allerdings im zweidimensionalen):

$$\begin{aligned} A_{n_1, n_2} \sin(\beta_{n_1, n_2}) &= \frac{4}{ab} \int_0^a dx \int_0^b dy \sin\left(\frac{n_1 \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi}{b} y\right) \eta_0(x, y) \\ A_{n_1, n_2} \cos(\beta_{n_1, n_2}) &= \frac{1}{\omega_{n_1, n_2}} \frac{4}{ab} \int_0^a dx \int_0^b dy \sin\left(\frac{n_1 \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi}{b} y\right) \eta_1(x, y) \end{aligned}$$

Nach Berechnung dieser Fourierkoeffizienten kann  $\eta(x, y, t)$  als Fourierreihe berechnet werden.

## Schluss

Hier endet das Skript zum theoretischen Teil der Vorlesung „Integrierter Kurs III: Theoretische Mechanik“ an der Universität Tübingen im WS 2006/2007.

Mein besonderer Dank gilt Herrn cand. Phys. Burkhard Schwab für seine große Hilfe und Geduld bei der Erstellung der Abbildungen und der Setzung des Textes in Latex.



---

## Anhang A

# Interessantes zu bedeutenden Physikern/Mathematikern

Isaac Newton

Newton war englischer Physiker und Mathematiker, aber auch Astrologe, Alchemist und „Naturphilosoph“. Er stellte als Erster die Gesetze der Gravitation auf. Zu seinen Leistungen gehört auch der erste vollständige Formalismus der klassischen Mechanik, die heute allgemein als „Newton'sche Mechanik“ bekannt ist. Wegen des hohen Alters, das Newton erreichte, konnte er seine Forschungsgebiete detailliert ausarbeiten. Er hatte einige prestigeträchtige Ämter inne, z.B. als Professor in Cambridge und als Aufseher der königlichen Münzanstalt, so dass er nie in Geldsorgen kam. Vielmehr hinterliess er ein stattliches Vermögen. Anscheinend hat er im Laufe seines Lebens kaum Geld ausgegeben, ausserdem hat er nie geheiratet. Bemerkenswert ist Newtons Hang zur Alchemie. Da er kaum vor zwei bis drei Uhr ins Bett ging, beschäftigte er sich vor allem Nachts mit dieser „Kunst“ und verfasste viele Bücher in der Alchemistsprache.

---

Gottfried Wilhelm Leibniz

Leibniz war deutscher Universalgelehrter. Zu seinen Arbeitsgebieten gehörten Rechtslehre, Mathematik, Physik, Philosophie, Theologie und Politik. Er erfand unabhängig und etwa zur selben Zeit wie Newton die Infinitesimalrechnung. Er prägte die immer noch gebräuchliche Form  $\frac{dy}{dx}$  der Differentialschreibweise. Im Laufe seines Lebens hat Leibniz die meisten Persönlichkeiten seiner Zeit entweder persönlich getroffen oder mit ihnen eine Korrespondenz aufgebaut. Er unterhielt mit mehr als 600 Menschen regelmässigen Briefkontakt.

---

Pierre-Louis Moreau de Maupertuis

Maupertuis war französischer Mathematiker, Astronom und Philosoph. Zu seinen Leistungen gehört die Entdeckung des Prinzips der kleinsten Wirkung. Über Maupertius' Leben gibt es einige kleinere Anekdoten, wie zum Beispiel, dass er wegen seines Aufenthaltes in Finnland in seinem späteren Leben oft noch die Tracht der Lappen getragen hat, oder die oft schwierigen Beziehungen zu anderen Wissenschaftlern seiner Zeit.

---

Leonhard Euler

Euler war wahrscheinlich einer der bedeutendsten Mathematiker des Abendlandes. Ein grosser Teil der konventionellen mathematischen Symbolik geht auf ihn zurück (z.B.  $e$ ,  $\pi$ ,  $\sum$ ,  $f(x)$ ). Allgemein kann man ihn als Begründer der Analysis ansehen, ausserdem hat er auch viele Leistungen auf dem Gebiet der Physik zu verbuchen, so arbeitete er die Hydrodynamik und die Kreiseltheorie aus. Ausserdem brachte er das Prinzip der kleinsten Wirkung in eine mathematische Form.

---

Joseph-Louis Lagrange

Lagrange war eigentlich französisch-italienischer Abstammung und wurde als Giuseppe Luigi Lagrangia geboren. Anstatt dem Wunsch seines Vaters nachzukommen und Jura zu studieren, lernte er Mathematik. Er brachte sich innerhalb eines Jahres das gesamte Wissen eines vollausgebildeten Mathematikers seiner Zeit bei. Er war als Mathematiker und Astronom tätig und begründete die analytische Mechanik mit der Entdeckung des Lagrange-Formalismus.

---

Carl Gustav Jacob Jacobi

Jacobi war deutscher Mathematiker. Jacobis Leistungen liegen vor allem auf dem Gebiet der Differentialrechnung, der Differentialgeometrie und der Variationsrechnung. Ausserdem entwickelte er die Theorie der elliptischen Funktionen.

---

Sir William Rowan Hamilton

Hamilton war irisch-englischer Mathematiker, Physiker und Astronom. Er entdeckte das Extremalprinzip, dass also jede Bewegung eines mechanischen Systemes so verläuft, dass die Wirkung stationär ist. Ausserdem entdeckte er die Algebra zur Beschreibung von Drehungen. Hamilton bemerkte eine enge Analogie zwischen geometrischer Optik und Mechanik von Punkteilchen, die später für die Entwicklung der Quantenmechanik wegweisend war.

# Literaturverzeichnis

**Apostol 1974**

APOSTOL, Tom M.: *Mathematical Analysis, 2nd Edition*. Addison Wesley, 1974. – ISBN 0201002884 15

**Arnold 1997**

ARNOLD, Vladimir I.: *Mathematical Methods of Classical Mechanics, 2. Auflage*. Springer, 1997. – ISBN 0387968903

**Corinaldesi 1998**

CORINALDESI, Ernesto: *Classical Mechanics for Physics Graduate Students*. World Scientific, 1998. – ISBN 9810236255

**Dittrich und Reuter 2001**

DITTRICH, Walter ; REUTER, Martin: *Classical and Quantum Dynamics, 3rd Edition*. Springer, 2001. – ISBN 3540562451

**Fischer und Kaul 2004**

FISCHER, Helmut ; KAUL, Helmut: *Mathematik für Physiker 2, 2. Auflage*. Teubner, 2004. – 56–70 S. – ISBN 3519120801 122

**Gantmakher 1960/1970**

GANTMAKHER, F. R.: *Lektsii po analiticheskoi mekhanike (Lectures on analytical mechanics)*. Fizmatgiz, English translation by G. Yankovsky, Mir Publishing, 1960/1970 42

**Goldstein u. a. 2002**

GOLDSTEIN, Herbert ; POOLE, Charles P. ; SAFKO, John L.: *Classical Mechanics, 3rd Edition*. Addison-Wesley, 2002. – ISBN 0201657023 42, 63

**Landau und Lifshitz 1982**

LANDAU, Lev D. ; LIFSHITZ, Evgenii M.: *Theoretical Physics: Mechanics, 3rd Edition*. Butterworth-Heinemann, 1982. – ISBN 0750628960

**Murray und Dermott 1999**

MURRAY, C.D. ; DERMOTT, S.F.: *Solar System Dynamics*. Cambridge University Press, 1999. – ISBN 0521575974

**Sommerfeld 1994**

SOMMERFELD, Arnold: *Theoretische Physik Band 1, Mechanik, 8. Auflage*. Harri, 1994. – ISBN 3871443743

**Whittaker 1937**

WHITTAKER, E. T.: *A Treatise on Analytical Dynamics*. Cambridge University Press, 1937 42