

14.2 Hamiltonsche Bewegungsgleichungen

•
$$H(\{q_j\}, \{p_j\}, t) = \sum_{j=1}^s p_j \dot{q}_j - L(\{q_j\}, \{\dot{q}_j\}, t) \quad (13.30)$$

 ... Hamilton-Fkt.

→
$$\begin{cases} \dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} \\ \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} \end{cases} \quad (14.4)$$

 ... Hamiltonsche (kanonische) Bew.gln.

•
$$\frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial t} \quad (14.5)$$

• Energieerhaltung:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} = 0$$

→ $H = T + U$
 Gesamtenergie für $\frac{\partial r_i}{\partial t} = 0$

• zyklische Koord.

$$\frac{\partial H}{\partial q_j} = 0 \rightarrow p_j = \alpha = \text{konst.} \quad (14.7)$$

14.3 Methode der Poisson-Klammer

• Observable / Meßgröße:

$$A = A(\{q_j\}, \{p_j\}, t) \quad (14.12)$$

 bestimmen Zustand des Systems eindeutig!

(i) Observable = „QM-Slang“

(ii) Bsp: H, q_j, p_j Schwerpt./-impuls

a) Zeitentwicklung von A: klar, wenn $\frac{dA}{dt}$ bekannt

$$\frac{dA}{dt} = \sum_j \left(\frac{\partial A}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial A}{\partial p_j} \dot{p}_j \right) + \frac{\partial A}{\partial t}$$

$$= \frac{\partial A}{\partial p_j} \dot{q}_j + \frac{\partial A}{\partial q_j} \dot{p}_j + \frac{\partial A}{\partial t}$$

→
$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t} \quad (14.13)$$

mit
$$\{A, H\} = \sum_j \frac{\partial A}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} \quad (14.14)$$

... Poisson-Klammer von A und H

Spezialfälle:

$$A = q_k \xrightarrow{(14.13)/(14.14)} \frac{\partial q_k}{\partial q_j} = \delta_{kj}, \frac{\partial q_k}{\partial p_j} = 0 \quad \dot{q}_k = \{q_k, H\} = \frac{\partial H}{\partial p_k}$$

$$A = p_k \xrightarrow{(14.13)/(14.14)} \frac{\partial p_k}{\partial p_j} = \delta_{kj}, \frac{\partial p_k}{\partial q_j} = 0 \quad \dot{p}_k = \{p_k, H\} = -\frac{\partial H}{\partial q_k}$$

(14.14)
 Hamiltonsche
 Bew. gl.

b) formale Eigenschaften: Rechnen!

$$\{A, B\} = \sum_j \left(\frac{\partial A}{\partial q_j} \cdot \frac{\partial B}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j} \cdot \frac{\partial B}{\partial q_j} \right) \quad (14.15)$$

... Poisson-Klammer

(i) Antisymmetrie:

$$\{A, B\} = -\{B, A\} \quad (14.16) \quad \dots \text{ nicht kommutativ}$$

$$\rightarrow \{A, A\} = 0 \quad (14.17)$$

(ii) Linearität:

$$\{c_1 A_1 + c_2 A_2, B\} = c_1 \{A_1, B\} + c_2 \{A_2, B\} \quad (14.18)$$

(iii) Nullelement?

$$\{c, A\} = 0 \quad (14.19)$$

Konstante

(iv) Produktregel:

$$\{A, BC\} = \{A, B\}C + B\{A, C\} \quad (14.20)$$

NB: Beachte Stellung von C bzw B in QM!

(v) Jacobi-Identität:

$$\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0 \quad (14.21)$$

↙ zyklisch durchtausch ↘

Beweise: (i)-(iv) durch Einsetzen

(v) nicht einfach

c) Beispiele/Rechnen!

$$(i) \{q_k, p_l\} = \sum_j \left(\underbrace{\frac{\partial q_k}{\partial q_j}}_{\delta_{kj}} \cdot \underbrace{\frac{\partial p_l}{\partial p_j}}_{\delta_{lj}} - \underbrace{\frac{\partial q_k}{\partial p_j}}_{=0} \cdot \underbrace{\frac{\partial p_l}{\partial q_j}}_{=0} \right)$$

$$\rightarrow \{q_k, p_l\} = \delta_{kl} \quad (14.22)$$

$$(ii) \{q_i, q_j\} = 0 = \{p_i, p_j\} \quad (14.23)$$

d) $\{...\}$ ist unabhängig von kanonischen Variablen!

• kanonische Transformation: $Q_k = Q_k(\{q_j\}, \{p_j\}, t)$
 $P_k = P_k(\{q_j\}, \{p_j\}, t)$

• Observable: $A(\{q_j\}, \{p_j\}, t) = \bar{A}(\{Q_j\}, \{P_j\}, t)$
 $B(\quad) = \bar{B}(\quad)$

o.B. → [s. Noting] $\{A, B\}_{Q,P} = \{\bar{A}, \bar{B}\}_{Q,P} = \{A, B\}$ (14.24)

⇒ $\{...\}$ erlauben Aussagen unabh. von Wahl der kanonischen Variablen

e) Integrale / Konstanten der Bewegung

(i) $\{A, H\} = -\frac{\partial A}{\partial t} \xrightarrow{\text{(14.13)}} \frac{dA}{dt} = 0 \rightarrow A = \text{konst.}$ (14.25)
 Bsp: Kap. 14.4

$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t}$

(ii) speziell: $\{A, H\} = 0 \ \& \ \frac{\partial A}{\partial t} = 0 \rightarrow A = \text{konst.}$ (14.26)

Bsp: Gesamtenergie $E = H$!

(iii) erzeuge neue Konstanten der Bewegung:

$\{H, A\} = \frac{\partial A}{\partial t}$
 $\{H, B\} = \frac{\partial B}{\partial t}$
 für A, B, H
 A = konst.
 B = konst.
 $\xrightarrow{\text{Jacobi Identität (14.21)}} \{H, \{A, B\}\} = \frac{\partial}{\partial t} \{A, B\}$
 (14.25) $\{A, B\} = \text{konst.}$ (14.27)
 ... Poisson'scher Satz!

f) Quantenmechanik

$\{A, B\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}] = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}]$ (14.28)

(i) $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h ... Plancksche Konstante

(ii) $[..., ...]$... Kommutator mit Eigenschaften 14.36) (i)-(v)

(iii) \hat{A}, \hat{B} ... Operatoren = Observablen
 (z.B. Matrizen, Differentialoperatoren)

(iv) Fundamental Klammern

$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$ (14.29)

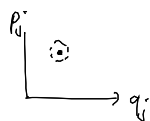
$[\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0 = [\hat{p}_i, \hat{p}_j]$

14.4. Liouville'scher Satz

- Ausblick in die statistische Mechanik
- Zustand eines Systems eindeutig bestimmt durch

$$X(t) = \{q_j(t), p_j(t)\}$$

= Punkt im Phasenraum



Problem: $N \stackrel{z.B.}{=} 1 \text{ Mol} = 6 \cdot 10^{23} \rightarrow$ nur unvollständige Info über System möglich

\rightarrow statistische Mechanik:
 trifft Aussagen über Wahrscheinlichkeiten
 & mittlere Größen

• Def:

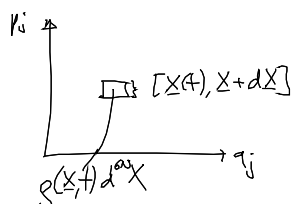
Dichte $\rho(X, t)$ im Phasenraum:

$\rho(X, t) d^{6N} X$... Wahrscheinlichkeit, System
 im Zustand aus $[X(t), X+dX]$
 anzutreffen

(14.31)

$\int_V \rho(X, t) d^{6N} X = 1$... "System ist irgendwo in V "
 = Normierung

dq_1, \dots, dq_{3N}
 dp_1, \dots, dp_{3N}



• Observable: $A = A(\{q_j\}, \{p_j\}, t) = A(X, t)$

Mittelwert = Erwartungswert

$$\langle A \rangle = \int d^{6N} X \rho(X, t) A(X, t)$$

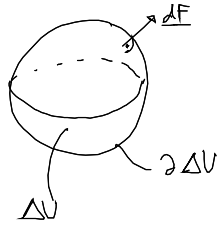
Wahrscheinlichkeit mit der $A(X, t)$ realisiert wird

(14.32)

Löfl:
 [Bsp: $1\frac{1}{2} + 2\frac{1}{6} + \dots + 6\frac{1}{6} = \frac{7}{2}$]

• Kontinuitätsgleichung: Herleitung

Ausgangspunkt: $\int_{\Delta V} \rho(X, t) d^{6N} X$... Wahrscheinlichkeit in
 System in ΔV anzutreffen
 Teilvolumen des gesamten
 Phasenraumes



zeitl. Änderung:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Delta V} \rho(\mathbf{x}, t) d^3x \stackrel{\Delta V \text{ fest}}{=} \int_{\Delta V} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) d^3x$$

$$= - \int_{\partial \Delta V} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \cdot d\mathbf{F} \quad (19.33)$$

System wird nicht „erzeugt“ oder „vernichtet“

Wahrscheinlichkeit (pro Zeiteinheit), daß System ΔV über $\partial \Delta V$ verläßt

Wahrscheinlichkeitsstromdichte: (19.34)

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t) \dot{\mathbf{x}}(t)$$