

10. und 11. Vorlesung Sommersemester

1 Die Legendre-Transformation

1.1 Noch einmal mit mehr Details

Diese Ableitung wirkt einfach, ist aber in dieser Form sicher nicht so leicht verständlich. Deswegen das das Ganze noch einmal, aber mit ausführlicher Notation und dem Beispiel daneben. Schrittweise wird die Funktion $f(x)$ in $g(u)$ überführt und dann basierend auf $g(u)$ die umgekehrte Transformation ausgeführt.

Schritt	Beispiel 1	Beispiel 2
$f(x)$	ax^2	$a(x+b)^2$
$u(x) = \frac{df}{dx}$	$u(x) = 2ax$	$u(x) = 2a(x+b)$
$x = x(u)$	$x(u) = \frac{u}{2a}$	$x(u) = \frac{u}{2a} - b$
$g(u) = ux(u) - f(x(u))$	$g(u) = \frac{u^2}{4a}$	$g(u) = \frac{u^2}{4a} - bu$
$x(u) = \frac{dg}{du}$	$x(u) = \frac{u}{2a}$	$x(u) = \frac{u}{2a} - b$
$u = u(x)$	$u = 2ax$	$u = 2a(x+b)$
$f(x) = ux(x) - g(u(x))$	$f(x) = ax^2$	$f(x) = a(x+b)^2$

Es ist also so wirklich möglich, die Transformation in beiden Richtungen auszuführen. Das funktioniert, um noch einmal auf den zentralen Punkt hinzuweisen, weil

$$\frac{dg(u)}{du} = \frac{d}{du}(ux(u) - f(x(u))) = x(u) + u \frac{dx}{du} - \frac{df}{dx} \frac{dx}{du} = x(u) \quad (1)$$

es ermöglicht, aus g wieder die ursprüngliche Variable x herauszupräparieren.

Das *Vorzeichen* der transformierten Funktion ist beliebig; für den Zweck spielt es ja keine Rolle. Man kann also $g = ux - f$ oder $g = f - ux$ schreiben; welches vorzuziehen ist, hängt von der physikalischen Bedeutung von g ab.

1.2 Mehrere Variablen

Wenn die Funktion von mehreren Variablen abhängt, dann verallgemeinert sich diese Vorgehensweise sehr einfach. Ausgehen von $f(x, y)$ kann man die entsprechenden Ableitungen — jetzt sind es partielle — definieren:

$$u = \frac{\partial f}{\partial x}, \quad v = \frac{\partial f}{\partial y} \quad (2)$$

und dann auf verschieden Weise Legendre-transformieren:

- $x \rightarrow u$: $g(u, y) = ux(u) - f(x(u), y)$,
- $y \rightarrow v$: $\bar{g}(x, y(v)) = vy(v) - f(x, y(v))$, sowie
- $x \rightarrow u$ und $y \rightarrow v$: $\tilde{g}(u, v) = ux(u) + vy(v) - f(x(u), y(v))$.

1.3 Anwendung in der Thermodynamik

Es sei kurz darauf hingewiesen, dass die Legendre-Transformation in der Thermodynamik eine wichtige Rolle spielt. Die *innere Energie* U ist eine Funktion der Variablen Entropie S und Volumen V , und ihre Ableitungen ergeben Druck p und Temperatur T :

$$U = U(S, V), \quad T = \frac{\partial U}{\partial S}, \quad p = -\frac{\partial U}{\partial V}. \quad (3)$$

Das ermöglicht die Legendre-Transformationen

- Enthalpie: $H(S, p) = U + pV$,
- freie Energie: $F(T, V) = U - TS$,
- freie Enthalpie: $G(T, p) = U - TS + pV$,

die als *thermodynamische Potentiale* eine große Rolle spielen.

2 Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

Die Anwendung der Legendre-Transformation auf die Lagrange-Funktion ist jetzt einfach. Es sollen alle generalisierten Geschwindigkeiten durch die Impulse ersetzt werden, also wird die transformierte Funktion

$$H(q_1, \dots, q_s, p_1, \dots, p_s, t) = \sum_{k=1}^s p_k \dot{q}_k - L(q_1, \dots, q_s, p_1, \dots, p_s, t), \quad (4)$$

wobei angedeutet wurde, dass in der Lagrange-Funktion die Beziehungen

$$\dot{q}_k = \dot{q}_k(q_1, \dots, q_s, p_1, \dots, p_s, t)$$

eingesetzt werden müssen, die man durch Auflösen der Definitionsgleichungen

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

erhält.

Das Ergebnis ist also einfach die schon bekannte Hamiltonfunktion. Zu bestimmen sind noch die zugehörigen Bewegungsgleichungen. Das geschieht am einfachsten über die Differentiale:

$$\begin{aligned} dH &= \sum_k \left(\dot{q}_k dp_k + p_k d\dot{q}_k - \frac{\partial L}{\partial q_k} dq_k - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} d\dot{q}_k \right) - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= \sum_k (\dot{q}_k dp_k - \dot{p}_k dq_k) - \frac{\partial L}{\partial t} dt \end{aligned} \quad (5)$$

Dabei wurde im vierten Term die Definition von p_k verwendet, so dass er sich gegen den zweiten weghebt, und der dritte über die Lagrangegleichungen (und wieder die Definition von p_k) umgeformt.

Aus (5) folgen sofort die *Hamiltonschen Bewegungsgleichungen*, auch *kanonische Gleichungen* genannt:

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}, \quad \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}. \quad (6)$$

2.1 Einfache Anwendung

Die Bedeutung der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen im Vergleich zu den Lagrange'schen zeigt sich im einfachen Fall eines Teilchens im Potential. Hier ist (wie schon früher abgeleitet)

$$L(x, \dot{x}) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x), \quad p = m\dot{x}, \quad H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x). \quad (7)$$

Neu ist, dass H jetzt explizit als Funktion von p geschrieben werden muss. Die Bewegungsgleichungen werden in derselben Reihenfolge wie in (6) zu

$$\dot{x} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = -\frac{dV}{dx}, \quad \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} = 0. \quad (8)$$

Die Bedeutung ist klar: die erste Gleichung ist nichts anderes als die, die die umgekehrte Legendre-Transformation erlaubt, indem man die Definition der Geschwindigkeiten erhält. Die zweite ist die Hamiltonsche Version des zweiten Newtonschen Axioms, und die dritte (die nur bei rheonomen Systemen wichtig ist) hängt mit der Energieerhaltung zusammen.

Man beachte, dass das Minuszeichen in der zweiten Gleichung mit dem Minuszeichen in der Beziehung zwischen Kraft und Potential verknüpft ist.

2.2 Energieerhaltung

Die Energieerhaltung sieht jetzt natürlich einfacher aus:

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= \sum_k \left(\frac{\partial H}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial H}{\partial p_k} \dot{p}_k \right) + \frac{\partial H}{\partial t} \\ &= \sum_k \left(\frac{\partial H}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right) - \frac{\partial L}{\partial t} \\ &= -\frac{\partial L}{\partial t}. \end{aligned} \quad (9)$$

Die alten Aussagen zur Energieerhaltung werden also in sehr einfacher Form reproduziert.

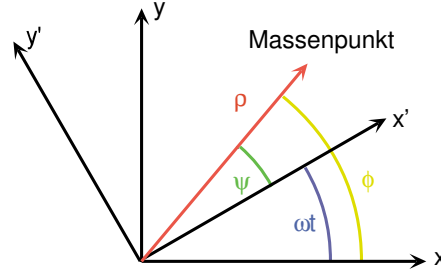
3 Eigenschaften der kanonischen Gleichungen

Die folgenden Eigenschaften sind hervorzuheben:

- Während die Lagrange-Funktion selbst keine direkte physikalische Bedeutung (im Sinne von messbarer Größe) hat, entspricht die Hamiltonfunktion im skleronomen Fall der Energie.
- die Bewegungsgleichungen enthalten nur erste Ableitungen in der Zeit.
- Die Bewegungsgleichungen sind im Phasenraum formuliert.
- Wenn eine Koordinate zyklisch ist, verschwindet auch der zugehörige Impuls aus der Beschreibung, da er konstant ist. Im Lagrange-Formalismus dagegen sind die generalisierten Geschwindigkeiten dann nicht unbedingt konstant.
- Man sollte aber nicht vergessen, dass die Lagrange-Funktion immer noch die Grundlage bietet: mit ihr werden die generalisierten Impulse definiert und erst mit ihnen kann die Hamiltonfunktion konstruiert werden.

4 Rotierendes Koordinatensystem

Ein Koordinatensystem in der Ebene rotiere mit konstanter Winkelgeschwindigkeit ω um seinen Ursprung. Dann ist der Winkel zwischen der x -Achse des raumfesten Systems und der x' -Achse des rotierenden ωt . Wir führen als generalisierte Koordinaten in beiden Polarkoordinaten ein. Da der Abstand vom Ursprung ρ sich nicht unterscheidet, braucht man nur verschiedene Winkel: ϕ im raumfesten und ψ im rotierenden. Dann gilt



$$\psi = \phi - \omega t, \quad \phi = \psi + \omega t. \quad (10)$$

Die kinetische Energie wird zu

$$T = \frac{m}{2} (\dot{\rho}^2 + \rho^2 \dot{\phi}^2) \quad (11)$$

oder im rotierenden System

$$= \frac{m}{2} (\dot{\rho}^2 + \rho^2 (\dot{\psi} + \omega)^2). \quad (12)$$

Die Lagrange-Funktion enthält noch ein Potential:

$$L = \frac{m}{2} (\dot{\rho}^2 + \rho^2 (\dot{\psi}^2 + 2\dot{\psi}\omega + \omega^2)) - V(r, \psi). \quad (13)$$

Hieraus bekommen wir die generalisierten Impulse:

$$p_\rho = \frac{\partial L}{\partial \dot{\rho}} = m\dot{\rho}, \quad p_\psi = m\rho^2(\dot{\psi} + \omega) = m\rho^2\dot{\phi}. \quad (14)$$

Der Impuls p_ψ ist also immer noch der physikalische Drehimpuls *im raumfesten System* (die Beziehung mit $\dot{\phi}$ ist physikalisch unwichtig, erlaubt es aber, in der kinetischen Energie einfacher p_ψ einzusetzen). Umgekehrt können wir auch die generalisierten Geschwindigkeiten durch die Impulse ausdrücken:

$$\dot{\psi} = \frac{p_\psi}{m\rho^2} - \omega, \quad \dot{\phi} = \frac{p_\psi}{m\rho^2} \quad (15)$$

und damit resultiert sofort die kinetische Energie:

$$T = \frac{p_\rho^2}{2m} + \frac{p_\psi^2}{2m\rho^2} \quad (16)$$

Nun kann man die Hamiltonfunktion aufstellen:

$$\begin{aligned} H &= p_\rho \dot{\rho} + p_\psi \dot{\psi} - L \\ &= p_\rho \cdot \frac{p_\rho}{m} + p_\psi \left(\frac{p_\psi}{m\rho^2} - \omega \right) - \frac{p_\rho^2}{2m} - \frac{p_\psi^2}{2m\rho^2} + V(\rho, \psi) \\ &= \frac{p_\rho^2}{2m} + \frac{p_\psi^2}{2m\rho^2} - p_\psi \omega + V(\rho, \psi) \end{aligned} \quad (17)$$

Den Zusatzterm $p_\psi\omega$ nennt man auch *Coriolis-Term*. Er wird meist als ωL geschrieben, da ja p_ψ mit dem Drehimpuls des Teilchens identisch ist.

Die kanonischen Bewegungsgleichungen werden zu

$$\dot{\rho} = \frac{\partial H}{\partial p_\rho} = \frac{p_\rho}{m} \quad (18)$$

und

$$\dot{\psi} = \frac{\partial H}{\partial p_\psi} = \frac{p_\psi}{m\rho^2} - \omega, \quad (19)$$

die beide einfach die Rückkehr zu den generalisierten Geschwindigkeiten erlauben, und

$$\dot{p}_\rho = -\frac{\partial H}{\partial \rho} = \frac{p_\psi^2}{m\rho^3} - \frac{\partial V}{\partial \rho} \quad (20)$$

sowie

$$\dot{p}_\psi = -\frac{\partial H}{\partial \psi} = -\frac{\partial V}{\partial \psi} \quad (21)$$

Die Bedeutung des ersten Terms auf der rechten Seite sieht man in $p_\psi = m\rho^2(\dot{\psi} + \omega)$ Spezialfälle einsetzt; etwa für $\omega = 0$ wird

$$\frac{p_\psi^2}{m\rho^3} = m\rho\dot{\psi}^2 \quad (22)$$

oder bei ruhendem Teilchen in rotierenden System, $\dot{\psi} = 0$:

$$\frac{p_\psi^2}{m\rho^3} = m\rho\omega^2, \quad (23)$$

stimmt also jeweils mit der Zentrifugalkraft überein.

Die so konstruierte Transformation auf rotierende Koordinaten wird häufig benutzt. Wenn z. B. ein Molekül oder Atomkern rotiert, so kann man die Bewegungsgleichungen für die darin enthaltenen Teilchen im mitrotierenden System formulieren, indem man einfach zur Hamiltonfunktion den Coriolis-Term hinzufügt.

5 Die Routh'sche Funktion

Manchmal ist es nützlich, nur für einen Teil der generalisierten Koordinaten die Legendre-Transformation auszuführen. Wenn man von den s Koordinaten z. B. nur die ersten n transformieren will, so geht das über

$$R = \sum_{k=1}^n p_k \dot{q}_k - L \quad (24)$$

Die Bewegungsgleichungen sind dann die Hamiltonschen für die ersten n und die Lagrange'schen für den Rest:

$$\dot{q}_k = \frac{\partial R}{\partial p_k}, \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial R}{\partial q_k}, \quad k = 1 \dots n \quad (25)$$

und

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial R}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial R}{\partial q_k} = 0, \quad k = n+1 \dots s \quad (26)$$

Eine typische Anwendung ist der Fall, in dem $q_1 \dots q_n$ zyklisch sind, aber $q_{n+1} \dots q_s$ leichter im Lagrange-Formalismus zu behandeln sind, z. B. weil die generalisierten Geschwindigkeiten nicht leicht durch die Impulse auszurechnen sind.

6 Weitere Variationsprinzipien

Der Einfachheit halber werden alle für eine einzige generalisierte Koordinate formuliert; die bisherigen Formeln sollten klar gemacht haben, wie alles durch Summen über die Freiheitsgrade auch für mehrere Koordinaten gültig gemacht werden kann.

6.1 Das Variationsprinzip im Hamiltonschen Formalismus

Für den Lagrange-Formalismus kennen wir das Hamiltonsche Prinzip

$$\begin{aligned} \delta S &= \delta \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt = 0 \\ \text{mit } q(t_1) &= q_1, q(t_2) = q_2 \text{ fest, } \delta q \text{ beliebig, } \delta \dot{q} = \frac{d}{dt}(\delta q). \end{aligned} \quad (27)$$

In der Hamiltonschen Form kann man auch davon ausgehen:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (p\dot{q} - H) dt = 0 \quad (28)$$

Die Wirkung ist jetzt ein Funktional von q und p , d. h. aber auch dass die beiden *unabhängig* voneinander variiert werden können. An den Endpunkten ist weiterhin $q(t_1) = q_1$ und $q(t_2) = q_2$ fest, aber $p(t_1)$ und $p(t_2)$ sind frei — \dot{q} kann ja auch an den Endpunkten nicht vorgeschrieben werden.

Damit rechnet man jetzt

$$\begin{aligned} 0 &= \delta S = \int_{t_1}^{t_2} \left((\delta p)\dot{q} + p \frac{d}{dt} \delta q - \frac{\partial H}{\partial q} \delta q - \frac{\partial H}{\partial p} \delta p \right) dt \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \left[\left(\dot{q} - \frac{\partial H}{\partial p} \right) \delta p - \left(\dot{p} + \frac{\partial H}{\partial q} \right) \delta q \right] dt, \end{aligned} \quad (29)$$

wobei der Beitrag der partiellen Integration an den Grenzen wieder wegfällt, da q dort nicht variiert wird (man beachte, dass diese Annahme für p tatsächlich nicht nötig ist).

Weil nun δp und δq unabhängig und beliebig sind, folgt

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \quad (30)$$

also die kanonischen Bewegungsgleichungen.