3.2 Poisson- Klammern, kanonische Transformationen

1781-1840

Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen,

$$\frac{dq_a}{dt} = +\frac{\partial H}{\partial p_a} \quad ; \quad \frac{dp_a}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_a}$$

sind schon fast symmetrisch unter Vertauschung von q und p. Um den letzten Schritt Richtung eines maximal „eleganten" Formalismus zu nehmen, führen wir den Begriff von Poisson-Klammern ein.

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

$$\frac{df}{dt} = \sum_a \frac{\partial f}{\partial q_a}\frac{dq_a}{dt} + \frac{\partial f}{\partial p_a}\frac{dp_a}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t}$$
$$= \sum_a \left(+\frac{\partial f}{\partial q_a}\frac{\partial H}{\partial p_a} - \frac{\partial f}{\partial p_a}\frac{\partial H}{\partial q_a} \right) + \frac{\partial f}{\partial t}$$

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

$$\{f,g\} := \sum_{a=1}^{s} \left(\frac{\partial f}{\partial q_a}\frac{\partial g}{\partial p_a} - \frac{\partial f}{\partial p_a}\frac{\partial g}{\partial q_a} \right)$$

definiert.

Folgen:

* $$\frac{df}{dt} = \{f,H\} + \frac{\partial f}{\partial t}$$

* $$\boxed{\begin{aligned} \frac{dq_a}{dt} &\overset{!}{=} \{q_a, H\} \\ \frac{dp_a}{dt} &\overset{!}{=} \{p_a, H\} \end{aligned}}$$

$$\left(\{q_a,H\} = \sum_b \overbrace{\frac{\partial q_a}{\partial q_b}}^{\delta_{ab}}\frac{\partial H}{\partial p_b} - \overset{0}{\cancel{\frac{\partial q_a}{\partial p_b}}}\frac{\partial H}{\partial q_b} \quad \text{ok!} \right)$$

$$\left(\{p_a,H\} = \sum_b \underset{0}{\cancel{\frac{\partial p_a}{\partial q_b}}}\frac{\partial H}{\partial p_b} - \underbrace{\frac{\partial p_a}{\partial p_b}}_{\delta_{ab}}\frac{\partial H}{\partial q_b} \quad \text{ok!} \right)$$

Allgemeine Eigenschaften:

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

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

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

(iv) „Jacobi- Identität" (1804-1851): $\{f,\{g,h\}\} + \{g,\{h,f\}\} + \{h,\{f,g\}\} = 0$.

Beweis mühsam:

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

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

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

Wichtige Spezialfälle:

$$* \quad \{q_a, q_b\} = \{p_a, p_b\} = 0 \qquad \left(\text{wegen } \frac{\partial q_b}{\partial p_a} = \frac{\partial p_b}{\partial q_a} = 0\right)$$

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

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

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

— ∘ —

Betrachten wir jetzt Koordinatentransformationen:

$Q_a = Q_a(q,t)$ „Punkttransformation im Koordinatenraum" (z.B. $(x,y) \to (r,\phi)$)

$\begin{cases} Q_a = Q_a(q,p,t) \\ P_a = P_a(q,p,t) \end{cases}$ „Punkttransformation im Phasenraum" (allgemeiner!)

Falls die neuen Koordinaten wieder „kanonisch" sind, d.h. die Werte von Poisson-Klammern nicht ändern ($\{f,g\}_{qp} = \{f,g\}_{QP}$; insbesondere

$$\{Q_a, Q_b\} = \{P_a, P_b\} = 0\,, \quad \{Q_a, P_b\} = \delta_{ab} \Big) ,$$

sprechen wir von einer <u>kanonischen Transformation</u>.

Zum Beispiel: $s=1$

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

$$\{f,g\}_{QP} = \frac{\partial f}{\partial Q}\frac{\partial g}{\partial P} - \frac{\partial f}{\partial P}\frac{\partial g}{\partial Q}$$

$$\Rightarrow \{f,g\}_{qp} = \left(\frac{\partial f}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial q} + \frac{\partial f}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial q}\right)\left(\frac{\partial g}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial p} + \frac{\partial g}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial p}\right)$$
$$- \left(\frac{\partial f}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial p} + \frac{\partial f}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial p}\right)\left(\frac{\partial g}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial q} + \frac{\partial g}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial q}\right)$$

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

$$= \{f,g\}_{QP}\,\frac{\partial(Q,P)}{\partial(q,p)} \,,$$

wobei $\displaystyle \frac{\partial(Q,P)}{\partial(q,p)} := \frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p} - \frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial P}{\partial q} = \{Q,P\}_{qp} = \det\begin{pmatrix} \frac{\partial Q}{\partial q} & \frac{\partial Q}{\partial p} \\ \frac{\partial P}{\partial q} & \frac{\partial P}{\partial p} \end{pmatrix}$ eins sein muß!

Im Falle einer linearen Transformation:

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

$$\frac{\partial(Q,P)}{\partial(q,p)} = \det\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} 1$$

$\Rightarrow$ die Matrix $A = (a_{ij})$ muß unimodular sein. Eine Möglichkeit ist eine Drehung, $A = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix}$, aber auch eine „Skalentransformation" wie $A = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \frac{1}{\lambda} \end{pmatrix}$ wäre möglich. (Auch $A = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ geht, d.h. $Q = -p$, $P = q$!)

— · —

Im allgemeinen Fall:

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

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

Auf der anderen Seite:

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

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

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

Die Bedingung

$$\{f,g\}_{qp} = \{f,g\}_{QP}$$

wird zum

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

Solche Matrizen M bilden eine „symplektische Gruppe" $Sp(2s)$.

$\left(A^T J A = J \;\; \& \;\; B^T J B = J \;\Rightarrow\; (AB)^T J AB = B^T A^T J A B = B^T J B = J \right)$.

Diese Gruppe ist die Grundlage für die „Mathematik der klassischen Mechanik"; z.B. V. Arnold, „Mathematische Methoden der klassischen Mechanik".

Bemerkungen :

* Zeitabhängigkeit kann auch als eine kanonische Transformation betrachtet werden !

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

Anfangsbedingungen

Beweis (infinitesimal):

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

$$M = \begin{pmatrix} \mathbb{1} + \Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial q_a \partial p_b} & -\Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial q_a \partial q_b} \\ +\Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial p_a \partial p_b} & \mathbb{1} - \Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial p_a \partial q_b} \end{pmatrix}$$

$$JM = \begin{pmatrix} +\Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial p_a \partial p_b} & \mathbb{1} - \Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial p_a \partial q_b} \\ -\mathbb{1} - \Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial q_a \partial p_b} & +\Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial q_a \partial q_b} \end{pmatrix}$$

$$M^T J M = \underbrace{\begin{pmatrix} \mathbb{1} + \Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial q_b \partial p_a} & +\Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial p_a \partial p_b} \\ -\Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial q_a \partial q_b} & \mathbb{1} - \Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial p_b \partial q_a} \end{pmatrix}}_{M^T} JM = J + \mathcal{O}(\Delta t)^2 \qquad \square$$

** Ziel : finde eine kanonische Transformation, so dass die Koordinaten Q_a zyklisch sind! Dann ist $H = H(P_a, t)$ und

$$\frac{dP_a}{dt} = 0 \,, \quad \frac{dQ_a}{dt} = \frac{\partial H}{\partial P_a} =: \omega_a = \text{Konstante}$$

falls keine t in H

$$\Rightarrow Q_a(t) = \omega_a t + Q_a(0) .$$

„Das System ist integrierbar."

*** Aus $M^T J M = J$ folgt $|\det M| = 1$. Daher gilt

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

$\Rightarrow$ Volumenelement im Phasenraum ist eine kanonische Invariante !
Wichtig in der statistischen Mechanik (sowie im Kapitel 3.3).

**** In der Quantenmechanik gilt:

$$\begin{tikzcd}
(q,p) \arrow[r, "\text{kanonische Transformation}"] \arrow[d, "\text{Quantisierung}"'] & (q',p') \arrow[d, "\text{Quantisierung}"] \\
(\hat{q},\hat{p}) \arrow[r, "\text{unitäre Transformation}"] & (\hat{q}',\hat{p}')
\end{tikzcd}$$