A Klassische und quantentheoretische Hamiltonmechanik

I Kanonische Bewegungsgleichungen, Hamiltonsches Prinzip

Ein System von Punktteilchen wird durch die Lagrangefunktion L oder die Hamiltonfunktion H beschrieben, welche zueinander in der Beziehung

$$L(q,\dot{q},t) = \sum p_i \dot{q}_i - H(q,p,t) \tag{1}$$

stehen. Die den verallgemeinerten Lagekoordinaten q, kanonisch zugeordneten Impulse p sind durch

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \tag{2}$$

gegeben. (q, p, stehen jeweils für die Gesamtheit der q_i, p_i). Die kanonischen oder Hamiltonschen Bewegungsgleichungen für N Punktteilchen

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad , \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad , \quad i = 1, 2, \ldots r \tag{3}$$

sind identisch mit den Eulerschen Gleichungen des Hamiltonsches Prinzip genannten Variationsproblems

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L\,dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} (\Sigma p_i \dot q_i - H)\,dt = \int_{t_1}^{t_2} (\Sigma (\dot q_i \delta p_i + p_i \delta \dot q_i - \frac{\partial H}{\partial q_i}\delta q_i - \frac{\partial H}{\partial p_i}\delta p_i)\,dt \overset{!}{=} 0. \quad (4)$$

(Mit dem Zeichen δ anstelle des Differentialoperators d wird ausgedrückt, daß die Zeit nicht mitvariiert wird.)

Die Bahn wird an ihrem Anfangs- und Endpunkt im Phasenraum festgehalten, so daß

$$\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0, \quad \delta p_i(t_1) = \delta p_i(t_2) = 0 \qquad (5)$$

gilt. Damit ergeben sich, wie sogleich gezeigt wird, aus Gl. (4) wieder die kanonischen Bewegungsgleichungen.

II Kanonische Transformationen, erzeugende Funktionen

Kanonisch heißen Transformationen, welche die kanonische Form der Bewegungsgleichungen ungeändert lassen so, daß in den neuen Koordinaten

$$Q_i = Q_i(q,p) \quad , \quad P_i = P_i(q,p)$$

statt der Gleichungen (3) die Gleichungen

$$\dot Q_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} \quad , \quad \dot P_i = -\frac{\partial K}{\partial q_i} \qquad (6)$$

gelten. Die Gesamtheit der kanonischen Transformationen läßt sich aus dem Hamiltonschen Prinzip wie folgt herleiten:

Das Glied $\dot q_i \delta p_i$ in Gl. (4) wird zunächst durch partielle Integration und Verwendung der ersten der Gleichungen (5) umgeformt;

$$\int_{t_1}^{t_2} p_i \delta \dot q_i\,dt = \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt}(p_i \delta q_i)\,dt - \int_{t_1}^{t_2} \dot p_i \delta q_i\,dt = -\int_{t_1}^{t_2} \dot p_i \delta q_i\,dt \,, \qquad 7$$

womit aus Gl. (4) in der Gestalt

$$\int_{t_1}^{t_2} (\Sigma (\dot q_i - \frac{\partial H}{\partial p_i})\delta p_i + \Sigma (-\dot p_i - \frac{\partial H}{\partial q_i})\delta q_i)\,dt = 0 \qquad 8$$

wegen der Beliebigkeit der Variationen $\delta p_i, \delta q_i$ die Identität der Eulerschen Gleichungen des Hamiltonschen Variationsprinzips mit den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen folgt. Das Hamiltonsche