

Contents

1	Vorübung: Volums-erhaltende Vektorfelder in der Ebene	1
2	Differentialformen	4
3	Hamilton-Mechanik	7
4	Der geodätische Fluss	11
5	Der Drehimpuls	14
6	Quantenmechanik	16
7	Verschränkung	20
8	Der Harmonische Oszillator	22

Diese Notizen sind Teil der Vorlesung "Gewöhnliche Differentialgleichungen und Dynamische Systeme" an der JKU Linz, WS 2017/18. Sie behandeln die Hamiltonsche Mechanik.

1 Vorübung: Volums-erhaltende Vektorfelder in der Ebene

Wie lassen sich Bewegungen von Körpern erklären bzw. mathematisch beschreiben? In den drei Newtonschen Axiomen

- ein Körper, auf den keine äußeren Kräfte einwirken, verharrt in Ruhe oder in gleichförmiger Bewegung;
- Kraft ist Masse mal Beschleunigung;
- zu jeder Kraft gibt es eine Gegenkraft

wird festgestellt, daß es keinen Sinn hat, eine Erklärung für die Geschwindigkeit (1.Ableitung) von Körpern zu suchen. Dagegen unterliegt die Beschleunigung (2.Ableitung) Gesetzen, die einer mathematischen Beschreibung zugänglich sind.

Beispiel 1.1. Angenommen, ein Teilchen mit Masse 1 bewegt sich in der Ebene unter der Einwirkung einer Kraft, deren Grösse 1 durch das Quadrat des Abstands zum Nullpunkt ist und die in Richtung des Nullpunkts zeigt. In Polarkoordinaten (r, ϕ) gilt für die zeitabhängige Position $P : \mathbb{R} \rightarrow (\mathbb{R}^2 \setminus \{(0, 0)\})$ und die ersten beiden Ableitungen

$$P = r \begin{pmatrix} \cos \circ \phi \\ \sin \circ \phi \end{pmatrix}, P' = r' \begin{pmatrix} \cos \circ \phi \\ \sin \circ \phi \end{pmatrix} + r\phi' \begin{pmatrix} -\sin \circ \phi \\ \cos \circ \phi \end{pmatrix},$$
$$P'' = r'' \begin{pmatrix} \cos \circ \phi \\ \sin \circ \phi \end{pmatrix} + 2r'\phi' \begin{pmatrix} -\sin \circ \phi \\ \cos \circ \phi \end{pmatrix} + r\phi'' \begin{pmatrix} -\sin \circ \phi \\ \cos \circ \phi \end{pmatrix} - r\phi'^2 \begin{pmatrix} \cos \circ \phi \\ \sin \circ \phi \end{pmatrix}.$$

Nach dem zweiten Newtonschen Axiom ist $P'' = -\frac{1}{r^2} \begin{pmatrix} \cos \circ \phi \\ \sin \circ \phi \end{pmatrix}$. Die beiden Vektoren $\begin{pmatrix} \cos \circ \phi \\ \sin \circ \phi \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} -\sin \circ \phi \\ \cos \circ \phi \end{pmatrix}$ sind zu jeder Zeit linear unabhängig, daher gilt

$$r'' - r\phi'^2 + \frac{1}{r^2} = 0, \quad 2r'\phi' + r\phi'' = 0.$$

Aus der zweiten Gleichung folgt $(r^2\phi')' = 2rr'\phi' + r^2\phi'' = 0$, also $r^2\phi' = c_1$ für eine Konstante $c_1 \in \mathbb{R}$: das zweite Kepler-sche Gesetz. Wir verwenden das, um aus der ersten Gleichung ϕ' zu eliminieren:

$$0 = r'' - r \left(\frac{c_1}{r^2} \right)^2 + \frac{1}{r^2} = r'' - \frac{c_1^2}{r^3} + \frac{1}{r^2}.$$

Anstatt diese Differentialgleichung für r zu lösen, wollen wir “nur” das erste Keplersche Gesetz beweisen: die Bahnen sind Kegelschnitte mit Brennpunkt im Nullpunkt. Die Gleichung in Polarkoordinaten (ρ, ψ) für die Kegelschnitte ist

$$\rho(\psi) = \frac{1}{A + B \cos(\psi)},$$

und der Nenner erfüllt eine einfache Differentialgleichung. Wir nehmen an, daß $c_1 \neq 0$ ist. Dann ist ϕ lokal invertierbar. Es sei $f := \frac{1}{r} \circ \phi^{-1}$, d.h. $r(t) = \frac{1}{f(\phi(t))}$. Wegen $r^2 \phi' = c_1$ gilt $\phi'(t) = c_1 f(\phi(t))^2$, und es folgt

$$r'(t) = -\frac{f'(\phi(t))\phi'(t)}{(f(\phi(t)))^2} = -c_1 f'(\phi(t)), \quad r''(t) = -c_1 f''(\phi(t))\phi'(t) = -c_1^2 f''(\phi(t))f(\phi(t))^2.$$

Nach dem Einsetzen der Ausdrücke für $r(t), r'(t), r''(t)$ kommt t nur mehr als Argument von ϕ vor. Es ergibt sich folgende Differentialgleichung für f :

$$0 = -c_1^2 f'' f^2 - c_1^2 f^3 + f^2 = f^2(-c_1^2 f'' - c_1 f + 1).$$

Der Wert von f kann nie 0 sein, also ist $f'' + f - \frac{1}{c_1} = 0$. Diese Gleichung können alle hier leicht lösen, die allgemeine Lösung ist

$$f(p) = c_2 \cos(p) + c_3 \sin(p) + \frac{1}{c_1};$$

damit ist das erste Keplersche Gesetz hergeleitet.

Die Newton-Mechanik ist nicht gut geeignet zur Beschreibung von eingeschränkten Bewegungen, bei denen sich die Körper nur auf bestimmten Teilmengen bewegen können (Pendel etc).

In der Hamilton-Mechanik ist der Phasenraum eines oder mehrerer Teilchen immer von geradzahlig Dimension: zu jeder Ortskoordinate gibt es eine Geschwindigkeitskoordinate. Die Bewegung wird dann beschrieben durch ein Vektorfeld auf dem Phasenraum, d.h. eine Differentialgleichung erster Ordnung. (Allgemein haben wir gesehen, dass Systeme von beliebiger Ordnung auf Systeme erster Ordnung zurückgeführt werden können mit Hilfe der Verwendung zusätzlicher Variablen.)

Das neue Element in der Hamilton-Mechanik (in Relation zu den Newton-schen Axiomen) ist die fundamentale Bedeutung von Erhaltungsgrößen. Darunter versteht man Funktionen vom Phasenraum in die reellen Zahlen, die entlang jeder Bahn konstant sind, oder equivalent dazu: deren vektorielle Ableitung identisch Null ist.

Bemerkung 1.1. Viele Besonderheiten von dynamischen Systemen sind unverträglich mit der Existenz von Erhaltungsgrößen: in der Nähe von Quellen, Senken, oder asymptotisch stabilen Zyklen muß jede Erhaltungsgröße notwendigerweise lokal konstant sein (und damit uninteressant). Die erwähnten Besonderheiten sind sogar strukturell stabil – das heißt, sie bleiben erhalten wenn das Vektorfeld geringfügig gestört wird; trotzdem treten sie in der Hamilton-Mechanik niemals auf, wie wir noch sehen werden. Dafür werden andere Besonderheiten dynamischer Systeme, nämlich Zentren und homokline Orbits, die durch kleine Störungen verloren gehen, in der Hamilton-Mechanik strukturell stabil.

Der Apparat ist nicht gerade leicht zugänglich, drum wird in diesem Abschnitt ein Spezialfall diskutiert, der weniger an Voraussetzungen benötigt, nämlich Volums-erhaltende Vektorfelder in der Ebene.

Im folgenden sei $U \subset \mathbb{R}^2$ offen und $F : U \rightarrow \mathbb{R}^2, (x, y) \mapsto (F_1(x, y), F_2(x, y))$ ein stetig differenzierbares Vektorfeld.

Definition 1.2. Die Divergenz von F ist definiert als die Funktion

$$\operatorname{div}(F) : U \rightarrow \mathbb{R}, \quad (x, y) \mapsto \frac{\partial F_1}{\partial x}(x, y) + \frac{\partial F_2}{\partial y}(x, y).$$

Definition 1.3. Es sei $\phi : D \subset \mathbb{R} \times U \rightarrow U$ der Fluß von F . Das Vektorfeld F heißt *volumserhaltend* wenn für alle meßbaren Teilmengen $K \subset U$ und für alle $t_0 \in \mathbb{R}$ sodaß $[0, t_0] \times K \in D$ gilt, daß K und $\phi(t_0, K) = \{\phi(t_0, x) \mid x \in K\}$ das gleiche Volumen haben.

Der folgende Satz wird später bewiesen (mit starken Hilfsmitteln, von denen wir die meisten ohne Beweis diskutieren werden).

Satz 1.2. F ist genau dann volumenserhaltend wenn $\operatorname{div}(F) = 0$ ist.

Beispiel 1.3. Die Divergenz des linearen Vektorfelds

$$(x, y) \mapsto (ax + by, cx + dy), \quad a, b, c, d \in \mathbb{R}$$

ist gleich der Konstante $a + d$. Die Eigenwerte der Jacobi-matrix sind dann $\pm\sqrt{ad - bc}$. Egal ob sie reell oder komplex sind, sie können nicht beide positiven oder beide negativen Realteil haben. Wir sehen, daß es (zumindest im linearen Fall) keine hyperbolischen Quellen oder Senken geben kann. Sattelpunkte treten auf und sind strukturell stabil. Der zweite Fall, der unter kleinen Störungen der Matrix – unter Beibehaltung der Bedingung $a + d = 0$ auftritt, ist der Fall von zwei konjugiert komplexen Eigenwerten auf der imaginären Achse. Hier ist der Nullpunkt ein so genanntes *Zentrum*: ein stabiler, aber nicht asymptotisch stabiler Gleichgewichtspunkte, der umgeben ist von lauter Zyklen.

Wir werden gleich sehen, daß dieses qualitative Verhalten auch für nichtlineare volumenserhaltende Vektorfelder in der Ebene typisch ist.

Satz 1.4. Es sei $F : U \rightarrow \mathbb{R}^2$ volumenserhaltend. Dann existiert eine nicht konstante stetig differenzierbare Funktion $H : U \rightarrow \mathbb{R}^2$, sodaß $\partial_F(H) \equiv 0$ ist.

Beweis. Wir setzen an

$$H(x, y) := - \int_0^x F_2(u, 0) du + \int_0^y F_1(x, v) dv.$$

Dann gilt für alle $(x, y) \in U$

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial x}(x, y) &= -F_2(x, 0) + \int_0^y \frac{\partial F_1}{\partial x}(x, v) dv = -F_2(x, 0) - \int_0^y \frac{\partial F_2}{\partial y}(x, v) dv = \\ &= -F_2(x, 0) - (F_2(x, y) - F_2(x, 0)) = -F_2(x, y), \\ \frac{\partial H}{\partial y}(x, y) &= F_1(x, y) \end{aligned}$$

und daher

$$\partial_F(H)(x, y) = -F_2(x, y)F_1(x, y) + F_1(x, y)F_2(x, y) = 0.$$

□

Wir merken uns aus dem Beweis, dass das Vektorfeld F aus H zurückgewonnen werden kann:

$$F(x, y) = \left(\frac{\partial H}{\partial y}(x, y), -\frac{\partial H}{\partial x}(x, y) \right).$$

Die Lösungen von F bewegen sich auf den Niveau-Linien von H . Wenn p_0 ein lokales Maximum oder Minimum ist, dann sind die Niveau-Linien in einer kleinen Umgebung geschlossene Kurven, und wir erhalten Zyklen. Wenn man eine Funktion mit zwei lokalen Maxima hat, dann liegt dazwischen ein Sattelpunkte, und die Niveau-Linie in der Höhe des Sattelpunktes besteht aus einer 8-Schleife mit Kreuzungspunkt im Sattelpunkt. Die beiden Schleifen sind homokline Orbits. Wenn die Funktion H geringfügig gestört wird, bleibt das qualitative Verhalten gleich: wir bekommen immer noch einen Sattelpunkt mit zwei homoklinen Orbits.

Das gleiche Verhalten zeigt auch ein schwingendes Pendel. Der Phasenraum ist zweidimensional, parametrisiert durch die Auslenkung und die Geschwindigkeit. Es gibt zwei Gleichgewichtspunkte, beide mit Geschwindigkeit 0. Der Pendeltiefpunkt ist ein stabiles Zentrum, kleine Abweichungen geben kleine und langsame Schwingungen. Der Pendelhochpunkt ist ein Sattelpunkt. Das Gleichgewicht ist instabil, und die Bahnen in der Nähe schwingen zum Tiefpunkt und wieder zurück. Es gibt genau zwei Bahnen, die im Grenzwert genau den Sattelpunkt erreichen, nämlich wenn das Energieniveau genau dazu reichen würde, bei Geschwindigkeit Null den Hochpunkt zu erreichen.

Übung 1.4. Es sei $F : U \rightarrow \mathbb{R}^2$ ein Vektorfeld mit einem asymptotisch stabilen Zykel Z . Man zeige, daß jede Erhaltungsgröße $g : U \rightarrow \mathbb{R}$ lokal in einer Umgebung von Z konstant ist.

2 Differentialformen

In der Vorübung haben wir gesehen, wie man für eine gegebene Funktion $H : U \rightarrow \mathbb{R}$ ein Vektorfeld konstruiert, für welches H eine Erhaltungsgröße ist. Und zwar im Fall $n = 2$. Wie läßt sich diese Konstruktion für beliebige gerade Zahlen verallgemeinern?

Bemerkung 2.1. Eine allgemeine Konstruktion eines Vektorfelds aus einer Funktion ist der Gradient. Dieses Feld erfüllt aber leider gerade nicht die gewünschte Eigenschaft: die Vektorableitung entlang des Gradienten ist immer positiv außer bei Equilibrien.

Zur Verallgemeinerung benötigen wir ein neues Konzept, das der Differentialformen. Dazu muß n nicht unbedingt gerade sein.

Definition 2.2. Es sei $U \subset \mathbb{R}^n$ offen, $k \in \mathbb{N}$, $0 \leq k \leq n$. Eine Differentialform k -ter Ordnung oder k -Form ist eine stetig differenzierbare Abbildung $U \rightarrow \mathbb{R}^{\binom{n}{k}}$.

Wir schreiben die Komponenten einer k -form als Koeffizienten von symbolischen Ausdrücken der Form $dx_1 \wedge \dots \wedge dx_k$, wobei x_1, \dots, x_k Variablen sind und die Verknüpfung \wedge antikommutativ ist, also $dx \wedge dy = -dy \wedge dx$ erfüllt für beliebige Variablen x, y . Daher ist auch $dx \wedge dx = 0$ und die Anzahl der Koeffizientenfunktionen einer k -Form ist $\binom{n}{k}$.

Die Menge aller k -Formen auf U wird mit $\Omega^k(U)$ bezeichnet.

Beispiel 2.1. Es sei $U = \mathbb{R}^2$. Alle 1-Formen die Gestalt $f(x, y)dx + g(x, y)dy$. Alle 2-Formen haben die Gestalt $h(x, y)dx \wedge dy$.

Differentialformen sind dazu erfunden worden, integriert zu werden. Für die 1-Form $f(x, y)dx + g(x, y)dy$ im Beispiel oben und für jede Kurve $C : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^2$, $t \mapsto (X(t), Y(t))$ ist das Kurvenintegral definiert als

$$\int_C f(x, y)dx + g(x, y)dy = \int_0^1 f(X(t), Y(t)) \frac{dX(t)}{dt} dt + \int_0^1 g(X(t), Y(t)) \frac{dY(t)}{dt} dt.$$

Der Wert des Kurvenintegrals bleibt unverändert, wenn man die Kurve umparametrisiert.

Übung 2.3. Es sei η die 1-Form $ydx - xdy$ in $\Omega^1(\mathbb{R}^2)$. Man berechne $\int_C \eta$ für die Kurve $C : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^2$, $t \mapsto (t^a, t^b)$, wobei $a, b > 0$ Parameter sind.

Die positiven n -Formen (von maximaler Ordnung) nennt man auch Volumsformen. Wenn η eine Volumsform ist, dann ist die Zuordnung $K \mapsto \int_K \eta$ ein Volumsmaß. Die Integrale von 2-Formen sind definiert auf Flächenstücken mit Orientierung. Solche Flächenintegrale werden zum Beispiel dazu verwendet, um zu berechnen, welche Flüssigkeitsmenge in eine gegebenen Zeit durch eine gegebene Querschnittsfläche fließt.

Eine triviale Variante des Integrals hat man bei den 0-Formen, das heißt Funktionen nach \mathbb{R} . Das Integral ist für Punkte definiert, und es ist einfach die Auswertung beim Punkt.

Bemerkung 2.4. Vektorfelder auf U und 1-Formen auf U haben die gleiche “Implementierung”, beide sind stetig differenzierbare Funktionen $U \rightarrow \mathbb{R}^n$. Trotzdem will man die zwei Dinge unterscheiden (indem man zu jeder Funktion dazusagt, ob das jetzt ein Vektorfeld oder eine 1-Form ist). Die Unterscheidung ist sinnvoll/notwendig, weil Vektorfelder und 1-Formen verschiedene Operationen erlauben und verschiedene Eigenschaften haben.

- Vektorfelder bestimmen einen Fluß und eine Differentialgleichung, 1-Formen nicht.
- Ein Vektorfeld ordnet jeder differenzierbaren Funktion $U \rightarrow \mathbb{R}$ eine andere Funktion zu, nämlich die vektorielle Ableitung. 1-Formen hingegen ordnen jeder differenzierbaren Kurve $[0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ eine Zahl zu, das Kurvenintegral.
- Vektorfelder und 1-Formen verhalten sich anders unter Koordinatentransformationen.

Tatsächlich sind 1-Formen oder überhaupt k -Formen leichter zu transformieren als Vektorfelder: man setzt ein, ersetzt $df(x_1, \dots, x_n)$ durch die Gradientenform $\frac{\partial f}{\partial x_1} dx_1 + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_n} dx_n$ und beachte beim Ausmultiplizieren des Hackprodukts die Antikommutativität (für 1-Formen ist nicht einmal das notwendig). Zum Beispiel ist die Transformation der Volumsform $dx \wedge dy$ in Polarkoordinaten

$$\begin{aligned} d(r \cos \phi) \wedge d(r \sin \phi) &= (\cos \phi \, dr - r \sin \phi \, d\phi) \wedge (\sin \phi \, dr + r \cos \phi \, d\phi) = \\ \cos \phi \sin \phi \, dr \wedge dr + r(\cos \phi)^2 dr \wedge d\phi - r(\sin \phi)^2 d\phi \wedge dr - r^2 \cos \phi \sin \phi \, d\phi \wedge d\phi &= \\ r((\cos \phi)^2 + (\sin \phi)^2) \, dr \wedge d\phi &= r \, dr \wedge d\phi. \end{aligned}$$

Sie erinnern sich an Übungszettel 7 und 9: um Vektorfelder zu transformieren, muß man nach dem Einsetzen und Umformen auch noch ein Gleichungssystem lösen (oder eine Jacobi-Matrix invertieren).

Differentialformen kann man nicht nur bezüglich Koordinatentransformationen (Isomorphismen) transformieren: das Einsetzen und Ausmultiplizieren geht genauso wenn man nur eine Abbildung $f : U \rightarrow V$ hat; U und V müssen dabei nicht einmal die selbe Dimension haben. Die Rücktransformation von $\eta \in \Omega^k(V)$ nach f ergibt eine k -Form $f^*\eta \in \Omega^k(U)$ (oder 0 wenn $k > \dim U$ ist). In jedem Fall gilt die allgemeine Substitutionsformel

$$\int_{f(K)} \eta = \int_K f^*\eta$$

für k -dimensionale Flächenstücke in V . Zur Berechnung eines Integrals einer k -form auf einer k -dimensionalen Fläche kann man eine Parametrisierung $p : U \rightarrow K$ mit $U \subset \mathbb{R}^k$ nehmen und dann die rücktransformierte k -Form auf U integrieren.

Übung 2.5. Man berechne das Kurvenintegral von Übung 2.3 durch Rücktransformation der 1-Form $ydx - xdy$ entlang der Parametrisierung $C : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^2, t \mapsto (t^a, t^b)$.

Definition 2.6. Die *äußere Ableitung* $d : \Omega^k(U) \rightarrow \Omega^{k+1}(U)$ ist definiert durch die folgenden Rechenregeln:

- $df = \frac{\partial f}{\partial x_1} dx_1 + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_n} dx_n$ für $f \in \Omega^0(U)$;
- $d(f \, dx_1 \wedge \dots \wedge dx_k) = df \wedge dx_1 \wedge \dots \wedge dx_k$
- $d(\eta_1 + \eta_2) = d\eta_1 + d\eta_2$.

Eine Differentialform $\eta \in \Omega^k(U)$ heißt *geschlossen*, wenn $d\eta = 0$ ist.

Zweimalige äußere Ableitung gibt immer 0. Daher ist jede Differentialform der Form $d\gamma$ geschlossen. Für $U = \mathbb{R}^n$ oder die für das Kugellinnere $U = \{x \mid x < \epsilon\}$ gilt auch die Umkehrung: jede geschlossene Form kann also Ableitung geschrieben werden.

Wie man aus der Definition sieht, ist der Gradient einer Funktion kein Vektorfeld, sondern eine 1-Form. Oder besser gesagt, es macht mehr Sinn, den Gradient als 1-Form zu verstehen. Die folgende Übung soll das verdeutlichen.

Übung 2.7. Das lineare Vektorfeld $(x, y) \mapsto (a_1x + b_1y, a_2x + b_2y)$ ist ein Gradientenfeld, wenn $a_2 = b_1$ ist. Man zeige, daß eine lineare Koordinatentransformation eines linearen Gradientenfeldes nicht immer ein Gradientenfeld ist.

Wann ist eine 1-Form $(a_1x + b_1y)dx + (a_2x + b_2y)dy$ geschlossen? Man zeige, daß jede lineare Koordinatentransformation einer geschlossenen linearen 1-Form wieder geschlossen ist.

Neben dem Gradienten lassen sich auch die Operatoren div und curl als Spezialfälle der äußeren Ableitung interpretieren.

- Es sei $F : (x_1, \dots, x_n) \mapsto (F_1(x_1, \dots, x_n), \dots, F_n(x_1, \dots, x_n))$ ein Vektorfeld. Wir schreiben das Vektorfeld rein formal um als $(n-1)$ -Form $\eta := F_1(x_1, \dots, x_n)dx_2 \wedge \dots \wedge dx_n - F_2(x_1, \dots, x_n)dx_1 \wedge \dots \wedge dx_n - \dots \pm F_n(x_1, \dots, x_n)dx_1 \wedge \dots \wedge dx_{n-1}$. Dann ist $d\eta = \operatorname{div}(F)dx_1 \wedge \dots \wedge dx_n$.
- Die äußere Ableitung der 1-Form $\eta := F_1dx_1 + F_2dx_2 + F_3dx_3$ in $\Omega^1(\mathbb{R}^2)$ ist die 2-Form

$$d\eta = \left(\frac{\partial F_2}{\partial x_1} - \frac{\partial F_1}{\partial x_2} \right) dx_1 \wedge dx_2 + \left(\frac{\partial F_3}{\partial x_2} - \frac{\partial F_2}{\partial x_3} \right) dx_2 \wedge dx_3 + \left(\frac{\partial F_1}{\partial x_3} - \frac{\partial F_3}{\partial x_1} \right) dx_3 \wedge dx_1.$$

Man vergleiche mit der Formel für die Rotation (curl) eines Vektorfelds im \mathbb{R}^3 .

Der nächste Satz (allgemeine Stokes'sche Integralformel) wird in dieser Vorlesung nicht verwendet, ich möchte ihn aber trotzdem (ohne Beweis) erwähnen, weil es eben der wichtigste Satz über die äußere Ableitung ist.

Satz 2.2. Es sei $\eta \in \Omega^k$ und K ein $k+1$ -dimensionales Flächenstück mit Rand ∂K . Dann gilt

$$\int_{\partial K} \eta = \int_K d\eta.$$

Hier die wichtigsten Spezialfälle.

- $k = 1$: Das Kurvenintegral des Gradienten von f ist die Differenz der Auswertung der Funktion an den Endpunkten der Kurve.
- $k = 2, n = 3$ (Gaußscher Integralsatz): das Integral der Divergenz von F über eines dreidimensionalen Bereich K ist das Oberflächenintegral von F entlang des Randes.
- $k = 1, n = 3$ (Satz von Stokes): das Kurvenintegral eines Vektorfelds entlang einer geschlossenen Kurve ist gleich dem Flächenintegral der Rotation über ein einem Flächenstück, das von dieser Kurve begrenzt wird.

Definition 2.8. Für k -Formen $\eta \in \Omega^k(U)$ und Vektorfelder $F : U \rightarrow \mathbb{R}^n$ ist die *Verkürzung* $i_F(\eta)$ definiert als eine $k-1$ -Form durch folgende Rechenregeln.

- $i_{(F_1, \dots, F_n)}(dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_k}) = F_{i_1} dx_{i_2} \wedge \dots \wedge dx_{i_k} - F_{i_2} dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_k} + \dots \pm F_{i_k} dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_{k-1}}$.
- $i_F(f\eta_1 + \eta_2) = f i_F(\eta_1) + i_F(\eta_2)$ für alle $f : U \rightarrow \mathbb{R}$, das heißt die Verkürzung ist linear über dem Ring der Funktionen.

Um die Verkürzung zu berechnen, muß man nichts ableiten, nur multiplizieren und addieren.

Übung 2.9. Die Verkürzung einer Differentialform verhält sich gutartig bei Koordinatentransformationen: Es sei $F : U \rightarrow \mathbb{R}^n$ ein Vektorfeld. Es sei $\tau : V \rightarrow U$ ein Isomorphismus. Es sei und $\tilde{F} : V \rightarrow \mathbb{R}^n$ das transformierte Vektorfeld. Es sei $\eta \in \Omega^k(U)$. Dann ist $i_{\tilde{F}}(\tau^*(\eta)) = \tau^*(i_F(\eta))$. Man zeige dies für den Fall $n = 1$ und $k = 1$.

Wir haben bereits die vektorielle Ableitung einer Funktion besprochen. Auch für Differentialformen ist die vektorielle Ableitung definiert.

Definition 2.10. Es sei $F : U \rightarrow \mathbb{R}^n$ ein Vektorfeld mit Fluß $\phi : (D \subset \mathbb{R} \times U) \rightarrow U$. Für jede k -Form η ist die vektorielle Ableitung definiert durch

$$\partial_F(\eta) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\phi_t^*(\eta) - \eta}{t},$$

wobei $\phi_t(x) := \phi(t, x)$ ist.

Proposition 2.3. Für Vektorfelder $F : U \rightarrow \mathbb{R}^n$ und k -Formen η gilt die Formel

$$\partial_F(\eta) = d(i_F(\eta)) + i_F(d\eta).$$

Übung 2.11. Man zeige, daß die Formel für 0-Formen stimmt.

Wir können nun den Beweis von Satz 1.2 nachtragen: ein Vektorfeld $F : U \rightarrow \mathbb{R}^n$ ist volumserhaltend, wenn die vektorielle Ableitung der konstanten Volumensform verschwindet: $\partial_F(dx_1 \wedge \cdots \wedge dx_n) \equiv 0$. Nach Proposition 2.3 ist das äquivalent zu $d(i_F(dx_1 \wedge \cdots \wedge dx_n)) \equiv 0$ (der zweite Summand in der Formel verschwindet, weil die äußere Ableitung einer k -Form 0 ist). Wenn $F = (F_1, \dots, F_n)$ ist, dann ist

$$i_F(dx_1 \wedge \cdots \wedge dx_n) = F_1 dx_2 \wedge \cdots \wedge dx_n - F_2 dx_1 \wedge \cdots \wedge dx_n - \cdots \pm F_n dx_1 \wedge \cdots \wedge dx_{n-1}$$

und daher

$$d(i_F(dx_1 \wedge \cdots \wedge dx_n)) = \left(\frac{\partial F_1}{\partial x_1} + \cdots + \frac{\partial F_n}{\partial x_n} \right) dx_1 \wedge \cdots \wedge dx_n = \operatorname{div}(F) dx_1 \wedge \cdots \wedge dx_n;$$

und diese Form ist genau dann 0 wenn $\operatorname{div}(F) \equiv 0$ ist.

3 Hamilton-Mechanik

Zur Erinnerung: die Hamilton-Mechanik beruht auf Erhaltungsgrößen. Im 2-dimensionalen Fall ist es gelungen, zu einer gegebenen Funktion nach \mathbb{R} ein Vektorfeld zu konstruieren, sodaß die die vektorielle Ableitung der Funktion verschwindet. Wir haben dazu das Konzept des Volumens verwendet, welches durch eine Volumensform bestimmt ist. Im Rückblick mit der Brille der Differentialformen kann man sagen, daß wir aus jedem $h : U \rightarrow \mathbb{R}$ zuerst das Differential $dh = \frac{\partial h}{\partial x} dx + \frac{\partial h}{\partial y} dy \in \Omega^1(U)$ genommen haben und dann das Vektorfeld H so bestimmt haben, daß $i_H(dx \wedge dy) = dh$ gilt. Daraus folgt dann

$$\partial_H(h) = i_H(dh) + d(i_H(h)) = i_H(i_H(dx \wedge dy)) = 0,$$

wenn man berücksichtigt, daß $i_H \circ i_H \equiv 0$ ist.

Übung 3.1. Man zeige, dass für alle Vektorfelder F, G und für jede k -Form η gilt: $i_F(i_G(\eta)) = -i_G(i_F(\eta))$. Daraus folgt $i_F(i_F(\eta)) = 0$.

Ein nochmaliger Blick sagt uns, daß die Rechnung für beliebige Dimension aufgehen sollte, nur muß man statt der Volumensform eine 2-Form nehmen. Statt der Positivität fordern wir die folgende Eigenschaft.

Definition 3.2. Eine 2-Form $\omega \in \Omega^2(U)$ heißt *symplektisch*, wenn sie geschlossen ist und wenn die Abbildung $i^\omega : \operatorname{Vect}(U) \rightarrow \Omega^1(U)$, $F \rightarrow i_F(\omega)$ bijektiv ist. Dabei ist $\operatorname{Vect}(U)$ die Menge aller Vektorfelder auf U .

Es sei $\omega = \sum_{i < j} \omega_{ij} dx_i \wedge dx_j$. Dann ist die Abbildung $F \rightarrow i_F(\omega)$ genau dann bijektiv wenn für alle $p \in U$ die schiefsymmetrische Matrix $M_\omega := (\omega_{ij}(p))_{ij}$ invertierbar ist; dabei setzen wir $\omega_{ij} = -\omega_{ji}$ für $j > i$. Die Koeffizienten der Form $i_\omega(F)$ sind nämlich genau die Koordinaten von $-M_\omega(F)$.

In der Hamilton-Mechanik ist der Phasenraum eine offene Menge $U \subset \mathbb{R}^n$ mit einer symplektischen Form ω . Die zeitliche Entwicklung wird durch eine Vektorfeld der Form $i^{-\omega}(dh)$ beschrieben. Die Erhaltungsgröße h heißt *Hamilton-Funktion*, und das dazugehörige Vektorfeld $H := i^{-\omega}(dh)$ heißt *Hamilton-Vektorfeld*. $i^{-\omega}$ ist eine Abkürzung für $(i^\omega)^{-1}$.

Was ist aus der Newton-schen Forderung, daß n gerade sein muß, geworden?

Proposition 3.1. *Schiefsymmetrische invertierbare Matrizen (und daher symplektische Formen) existieren nur in gerader Dimension.*

Beweis. Wenn S eine schiefsymmetrische $n \times n$ -Matrix ist, dann ist $\det(S) = \det(-S^T) = (-1)^n \det(S)$. Für ungerade n folgt $\det(S) = 0$. \square

Bemerkung 3.3. Was ist der Sinn der Forderung, daß ω geschlossen sein muß? Es sei h eine Hamilton-Funktion mit Hamilton-Vektorfeld H . Dann ist

$$\partial_H(\omega) = i_H(d\omega) + d(i_H(\omega)) = i_H(d\omega) + d(dh) = i_H(d\omega).$$

Wenn ω geschlossen ist, dann folgt $\partial_H(\omega) = 0$, und das ist schon wünschenswert (und zwar für jedes Hamilton-Vektorfeld H). Wäre dem nicht so, dann würde der Fluß die symplektische Form verändern.

Beispiel 3.2 (Standard-Form). Es sei $n = 2m$. Wir bezeichnen die Koordinaten des \mathbb{R}^n mit $p_1, \dots, p_m, q_1, \dots, q_m$. Dann ist

$$\omega = \sum_{i=1}^m dp_i \wedge dq_i$$

symplektisch. Die Matrix M_ω ist die Blockmatrix $\begin{pmatrix} 0 & -I_m \\ I_m & 0 \end{pmatrix}$ (die einfachste schiefsymmetrische invertierbare Matrix, die es man sich vorstellen kann). Für die Hamilton-Funktion $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ erhalten wir das Hamilton-Vektorfeld

$$i^{-\omega}(h) = \left(\frac{\partial h}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial h}{\partial q_m}, -\frac{\partial h}{\partial p_1}, \dots, -\frac{\partial h}{\partial p_m} \right).$$

Beispiel 3.3 (Teilchen in Potentialfeld). Wir betrachten ein Teilchen mit Masse 1 in \mathbb{R}^3 , das sich in einem Kraftfeld bewegt. Die Kraft ist minus der Gradient einer Potentialfunktion $u : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$. Wir bezeichnen die Ortskoordinaten mit q_1, q_2, q_3 und die Geschwindigkeitskoordinaten mit p_1, p_2, p_3 . Die symplektische Form ist die Standard-Form. Die potentielle Energie ist $u(q_1, q_2, q_3)$ und die kinetische Energie ist $\frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2 + p_3^2)$. Die Hamilton-Funktion ist die Gesamtenergie

$$h(p_1, \dots, q_3) = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) + u(q_1, q_2, q_3).$$

Die Bewegungsgleichungen sind

$$p'_i = -\frac{\partial h}{\partial q_i} = -\frac{\partial u}{\partial q_i}, \quad q'_i = \frac{\partial h}{\partial p_i} = p_i, \quad i = 1, \dots, 3.$$

Wenn man die Geschwindigkeitsfunktionen in der zweiten Gleichung in die erste Gleichung einsetzt, ergeben sich die Newton-schen Bewegungsgleichungen $q''_i = -\frac{\partial u}{\partial q_i}$, $i = 1, \dots, 3$.

Bei der Untersuchung von struktureller Stabilität von Hamilton-Systemen nimmt man an, daß die symplektische Form die Standard-Form ist, und stört nur die Hamilton-Funktion und nicht die symplektische Form (so wie wir es auch schon im 2-dimensionalen Fall gemacht haben). Die Rechtfertigung für ein solches Vorgehen ist der folgende Satz.

Satz 3.4 (Darboux). Für jede symplektische Form und für jeden Punkt $x_0 \in U$ existiert eine Umgebung V von x_0 und eine lokale Koordinaten-Transformation $W \rightarrow V$, die die gegebene Form in die Standard-Form transformiert.

Zusatz: Wenn zusätzlich ein Hamilton-Funktion $h : U \rightarrow \mathbb{R}$ gegeben ist, deren Gradient in x nicht Null ist, dann kann man die Koordinatentransformation so wählen, daß h die erste Koordinatenfunktion ist.

Bemerkung 3.4. Man reduziert also lokal auf den Fall ω ist die Standardform und $h = p_1$. Die Bewegungsgleichungen lassen sich sofort lösen: $p_1, \dots, p_m, q_2, \dots, q_m$ sind konstant, und $q_1(t) = p_1 t + c$. Man vergleiche mit dem ersten Newton-schen Gesetz.

Zum Beweis benötigen wir ein letzte Definition, die Poisson-Klammer $\{, \} : \Omega^0(U) \times \Omega^0(U) \rightarrow \Omega^0(U)$. Man kann sie auf mehrere Arten definieren. Es seien $f, g : U \rightarrow \mathbb{R}$, $F := i^{-\omega}(f)$, $G := i^{-\omega}(g)$. Dann ist

$$\{f, g\} = \partial_G(f) = -\partial_F(g) = i_F(i_G(\omega)) = -i_G(i_F(\omega)).$$

Aus der Definition folgt, daß sich die Wert einer Funktion entlang einer Bewegungsbahn wie seine Poisson-Klammer mit der Hamilton-Funktion ändert. Insbesondere gilt das für die Koordinatenfunktionen p_1, \dots, q_m :

$$p'_i = \{p_i, h\}, \quad q'_i = \{q_i, h\}, \quad i = 1, \dots, m.$$

Diese Formulierung spielt eine Rolle in der Quantenmechanik.

Eigenschaften der Poisson-Klammer. Es seien $f, g, h : U \rightarrow \mathbb{R}$, $c \in \mathbb{R}$.

Linearität $\{f, cg + h\} = c\{f, g\} + \{f, h\}$

Antikommutativität $\{f, g\} = -\{g, f\}$

Leibniz-Regel $\{f, gh\} = g\{f, h\} + h\{f, g\}$

Jacobi-Identität $\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0$

Vektorielle Ableitung Es sei $F := i^{-\omega}(f)$, $G := i^{-\omega}(g)$, $[F, G] := i^{-\omega}(\{f, g\})$.

Dann ist $\partial_F \circ \partial_G - \partial_G \circ \partial_F = \partial_{[F, G]}$

Standard-Darstellung Wenn ω die Standard-Form ist, dann ist $\{f, g\} = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \right)$.

Wenn $\{f, g\}$ konstant ist, dann ist kommutieren die beiden Vektorfelder: $\partial_F \circ \partial_G = \partial_G \circ \partial_F$. Dann kommutieren auch die beiden Flussabbildungen $x \mapsto \phi_F(t, x)$ und $x \mapsto \phi_G(s, x)$ für alle $s, t \in \mathbb{R}$.

Beweis von Satz 3.4. Induktion nach m . Für $m = 1$ nehmen wir eine beliebige stetig differenzierbare Funktion $h : U \rightarrow \mathbb{R}$, die bei x_0 nicht stationär ist (also $H(x_0) \neq 0$). Es sei $Y \subset U$ eine Gerade durch x_0 , die H transversal schneidet. Wir definieren auf einer geeigneten Umgebung V von x_0 die Funktion $f : V \rightarrow \mathbb{R}$ als "Ankunftszeit in Y ", also so dass $\phi_H(f(x), x) \in Y$ gilt für alle $x \in V$. Dann ist $\delta_H(f) = 1$, und daher $\omega = df \wedge dh$; in den Koordinaten (f, h) ist ω die Standard-Form.

Es sei $m > 1$. Wir wählen wieder eine stetig differenzierbare Funktion $h : U \rightarrow \mathbb{R}$, die bei x_0 nicht stationär ist, und eine Hyperebene $Y \subset U$ durch x_0 , die $H := i^{-\omega}(h)$ transversal schneidet. Wir definieren f wieder als "Ankunftszeit in Y ". Dann ist $\delta_H(f) = 1$. Die erste und die $(m + 1)$ -te Koordinatenfunktion haben wir dann schon. Außerdem gilt, dass die Vektorfelder H und $F := i^{-\omega}(f)$ vertauschbar sind, weil $\{f, h\} = 0$ ist.

Wir wählen einen $(n - 2)$ -dimensionalen Unterraum $Z \subset U$ durch x_0 , der beide Vektorfelder transversal schneidet. In einer Umgebung V von x_0 kann man jeden Punkt durch die Flüsse F und H zu einem eindeutig bestimmten Punkt in Z steuern. Damit kann man eine stetig differenzierbare Projektionsabbildung $\pi : V \rightarrow Z$ definieren, sodaß $\pi(z) = z$ für alle $z \in U$ ist.

Die Einschränkung $\omega|_Z$ ist eine symplektische Form auf Z , die Einschränkung von geschlossenen Formen ist nämlich immer geschlossen. (Streng genommen müßten wir auch noch zeigen, dass die Matrix der eingeschränkten Form nicht-degeneriert sein, das ist aber nicht sehr überraschend und wir sparen es uns.) Nach Induktionsvoraussetzung gibt Koordinatenfunktionen $u_2, \dots, u_m, v_2, \dots, v_m : Z \rightarrow \mathbb{R}$, sodass $\omega|_Z = \sum_{i=2}^m du_i \wedge dv_i$ ist. Wir definieren die Koordinatenfunktionen

$$p_1 := f, \quad q_1 := h, \quad p_i := \pi^*(u_i) = u_i \circ \pi, \quad q_i := \pi^*(v_i) = v_i \circ \pi, \quad i = 2, \dots, m.$$

Dann gilt $\{p_i, f\} = \partial_F(p_i) = 0$ und $\{p_i, h\} = \partial_H(p_i) = 0$, weil p_i entlang den Flüssen von F und H konstant ist; analog $\{q_i, f\} = \{q_i, h\} = 0$. Auf dem Unterraum Z ist auch $\{p_i, q_j\} = \delta_{ij}$ für $i, j = 2, \dots, m$. Die vektorielle Ableitung von $\{p_i, q_j\}$ nach F ist aber nach der Jacobi-Identität gleich

$$\{f, \{p_i, q_j\}\} = -\{p_i, \{q_j, f\}\} - \{q_j, \{f, p_i\}\} = -\{p_i, 0\} - \{q_j, 0\} = 0,$$

und analog für die vektorielle Ableitung nach H . Daher ist $\{p_i, q_j\} = 0$ auf ganz V . Das bedeutet, dass ω im Koordinatensystem p_1, \dots, q_m die Standard-Form ist.

Der Zusatz folgt daraus, daß man am Beginn der Induktion h beliebig wählen kann, wenn nur der Gradient bei x_0 nicht verschwindet. \square

In der Literatur zur Hamilton-Mechanik findet man kaum Beispiele, bei denen die symplektische Form *nicht* die Standard-Form ist. Das folgende Beispiel zeigt aber, dass man das auch übertreiben kann.

Beispiel 3.5 (Magnetfeld). Wir betrachten ein elektrisch geladendes Teilchen mit Masse 1, das sich in einem Magnetfeld $M : (q_1, q_2, q_3) = (M_1(\dots), M_2(\dots), M_3(\dots))$ bewegt. Wir nehmen die Geschwindigkeitskoordinaten v_1, v_2, v_3 noch dazu und wollen dann auf die Bewegungsgleichungen

$$\vec{q}' = \vec{v}, \quad (\vec{p})' = M(\vec{q}) \times \vec{p}$$

kommen. Dazu wählen wir die Form

$$\omega = p_1 \wedge q_1 + p_2 \wedge q_2 + p_3 \wedge q_3 - M_1(\vec{q})dq_2 \wedge dq_3 - M_2(\vec{q})dq_3 \wedge dq_1 - M_3(\vec{q})dq_1 \wedge dq_2,$$

d.h. die Standard-Form minus die Verkürzung der 3-Form $dq_1 \wedge dq_2 \wedge dq_3$ mit dem Vektorfeld M ; sowie die Hamilton-Funktion

$$h(\vec{v}, \vec{q}) = \frac{1}{2} \langle \vec{v} | \vec{v} \rangle.$$

Die Inverse von $(-M_\omega)$ ist dann die 6×6 Blockmatrix $\begin{pmatrix} 0 & -I_3 \\ I_3 & B \end{pmatrix}$, wobei A die 3×3 -Matrix ist, für die $A\vec{v} = M(\vec{q} \times \vec{v})$ ist. Das Hamilton-Vektorfeld $H = i^{-\omega}(h)$ definiert dann genau die Bewegungsgleichungen oben.

Um die symplektische Form auf Standard-Form zu bringen, lassen wir die Ortskoordinaten unverändert und ersetzen die Geschwindigkeitskoordinaten v_i durch Impulskordinaten $p_i := v_i + n_i$, $i = 1, 2, 3$. Wir setzen der Einfachheit halber $M = (0, 0, 1)$. In den neuen Koordinaten ist

$$\begin{aligned} \omega = & dp_1 \wedge d(p_1 - n_1) + dp_2 \wedge d(p_2 - n_2) + dp_3 \wedge d(p_3 - n_3) - dq_1 \wedge dq_2 = \\ & dp_1 \wedge dq_1 + dp_2 \wedge dq_2 + dp_3 \wedge dq_3 \\ & - dq_1 \wedge dq_2 - dn_1 \wedge dq_1 - dn_2 \wedge dq_2 - dn_3 \wedge dq_3, \end{aligned}$$

das heißt der Term in der letzte Zeile soll Null werden. Durch Draufschaun lassen sich zwei Möglichkeiten erraten, nämlich $(n_1, n_2, n_3) = (0, -q_1, 0)$ oder $(n_1, n_2, n_3) = (q_2, 0, 0)$.

Der Summand \vec{n} wird in der Literatur "magnetischer Impuls" genannt. Wie das Beispiel oben zeigt, hängt dieser magnetische Impuls nicht nur vom Magnetfeld ab, sondern auch von der Art, wie man auf Standard-Form transformieren will. Wenn man sich allerdings damit abfindet, dass die symplektische Form eben manchmal auch anders sein kann, braucht man den magnetischen Impuls gar nicht.

Ein Vorlesungsteilnehmer stellte die sehr berechtigte Frage: Woher kommt die symplektische Struktur? Wie berechnet man sie? Hier ein Versuch, die erste Frage zu beantworten (auf Fragen nach dem Wesen von Dingen gibt es oft keine eindeutige Antwort): Die symplektische Struktur ist einfach ein naturgegebener Teil des Phasenraums, an den wir nicht so gewöhnt sind. Wir sind schon eher gewöhnt an die Struktur des Volumens, der ja auch durch eine Differentialform beschrieben wird. Zur zweiten Frage, wie man sie berechnet: die symplektische Struktur bestimmt: man will auf jeden Fall haben, dass das Vektorfeld P , das den Ort linear in eine bestimmte Richtung verschiebt und den Impuls unverändert lässt, zur Impuls-Funktion in die diese Richtung gehört. Dadurch sind schon $3/4$ der Einträge von M_ω eindeutig festgelegt. Es bleibt noch die Bestimmung des restlichen Viertels, das von einem Magnetfeld abhängen kann; im Beispiel oben wurde diese Viertel so gewählt, dass die Ablenkung der Geschwindigkeit in durch das Magnetfeld einfließt. Am logischsten wäre es, das restliche Viertel auch noch aus Symmetrien herzuleiten.

4 Der geodätische Fluss

Die Bewegung eines Teilchens mit Masse 1 in einer gekrümmten Mannigfaltigkeit im Raum (was immer das ist, z.B. eine Fläche im \mathbb{R}^3) erfolgt nach den Gesetzen der Hamilton-Mechanik auf "geodätischen Kurven", das heißt solche, die die kürzeste Verbindung zwischen zwei Punkten sind, die nahe genug zueinander sind. Auf der Kugel sind die geodätischen Kurven genau die Großkreise. Die geodätischen Kurven auf Ellipsoiden lassen sich nur numerisch berechnen und zeigen chaotisches Verhalten. Ein degenerierter Fall tritt auf, wenn man das Ellipsoid immer flacher macht, sodass man im Grenzwert eine Fläche bekommt, die aus zwei zusammengeklebten Inneren von der gleichen Ellipse besteht. Im Grenzfall sind die geodätischen Kurven Geraden im Innern der Ellipse, die, sobald sie en Rand erreichen, an der Tangente gespiegelt werden, sodass sie wieder ins Innere weitergehen, aber auf der Rückseite. Mit anderen Worten, es ist die Bahn einer Billardkugel auf einem Tisch, der die Form einer Ellipse hat. Auch diese stückweise geraden Linien zeigen chaotisches Verhalten.

Wir wollen nun die Bewegungsgleichungen für diese geodätische Bewegung aufstellen. Es seien $m \leq M$ zwei natürliche Zahlen, $U \subset \mathbb{R}^m$ offen, und $\alpha : U \rightarrow \mathbb{R}^M$ eine differenzierbare Abbildung, deren Jacobi-Matrix Rang m in jedem Punkt hat. Dann (und nur dann) ist das Bild $\alpha(U)$ eine m -dimensional "Mannigfaltigkeit" im \mathbb{R}^M . Wir bezeichnen die Koordinaten in U mit $\vec{q} = (q_1, \dots, q_m)$. Der Geschwindigkeitsvektor im Parameter-Raum U ist \vec{q}' . Für die kinetische Energie ist die Geschwindigkeit im \mathbb{R}^M interessant: Sie ist $J(\vec{q})\vec{q}'$, wobei $J(\vec{q})$ die Jacobi-Matrix von α sei; eine $m \times M$ -Matrix von Rang m . Nach Newton sind die Geschwindigkeiten Teil des Systems, wir führen also zusätzliche Koordinatenfunktionen $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_m$ ein, sodaß die Geschwindigkeit dem Vektor \vec{q} entspricht. Die Hamilton-Funktion ist die kinetische Energie

$$h := \frac{1}{2} \langle J(\vec{q})\vec{q}' | J(\vec{q})\vec{q}' \rangle = \frac{1}{2} \langle \vec{q}' | A(\vec{q})\vec{q}' \rangle,$$

wobei $A(\vec{q}) := J(\vec{q})^T J(\vec{q})$ ist. Diese ist eine $m \times m$ -Matrix von Rang m , also invertierbar.

Bemerkung 4.1. In einer früheren Version und auch in der Vorlesung habe ich die Funktionen $\dot{q}_i : U \rightarrow \mathbb{R}$ einfach mit q'_i bezeichnet; für ein Teilchen mit Bahn $t \mapsto q_i(t)$ entsprechen sie auch den Ableitungen der Ortsfunktionen in Abhängigkeit von t . Damit verliert man aber das Recht, den Strich als Differentialoperator von Funktionen von \mathbb{R} irgendwohin zu gebrauchen, und das ist auch nicht gut. Darum führen wir neue Funktionssymbole ein, die den Geschwindigkeiten entsprechen. Noch einmal: die q_i und \dot{q}_i sind Funktionen des Phasenraums, man stelle sie sich als messbare Eigenschaften des Teilchens vor.

Bemerkung 4.2. Im folgenden werden wir die Ortskoordinaten \dot{q}_i durch Impulskoordinaten p_i ersetzen, also eine Koordnatentransformation durchführen. Durch die neuen Koordinaten wird allerdings auch die Bedeutung der Notation für die partielle Ableitung geändert. Die folgende Übung soll das verdeutlichen.

Übung 4.3. Es sei $U \subset \mathbb{R}^2$, $f, u, v : U \rightarrow \mathbb{R}$ differenzierbar, wobei (u, v) ein Koordinatensystem bilden (damit ist gemeint, die Funktion $(x, y) \mapsto (u(x, y), v(x, y))$ ist ein Isomorphismus). Man berechne $\frac{\partial f}{\partial u} : U \rightarrow \mathbb{R}$ in folgenden Fällen.

- a) $f(x, y) = x^2 + y^2, u(x, y) = x, v(x, y) = y$
 b) $f(x, y) = x^2 + y^2, u(x, y) = x + y, v(x, y) = y$
 c) $f(x, y) = x, u(x, y) = x^2 + y^2, v(x, y) = y$

Um die symplektische Standard-Form zu bekommen, definieren wir den Impuls als $\vec{p} := A(\vec{q})\vec{q}$ und ersetzen die Geschwindigkeitskoordinaten durch Impulskoordinaten mittels $\vec{q} := A(\vec{q})^{-1}\vec{p}$. Es ergibt sich

$$h(\vec{p}, \vec{q}) = \frac{1}{2} \langle A^{-1}(\vec{q})\vec{p} | \vec{p} \rangle$$

und die Bewegungsgleichungen sind

$$\vec{q}_i' = \frac{\partial h}{\partial p_i} = \frac{1}{2} \langle A^{-1}(\vec{q})\vec{p} | e_i \rangle + \frac{1}{2} \langle A^{-1}(\vec{q})e_i | \vec{p} \rangle = \langle A^{-1}(\vec{q})\vec{p} | e_i \rangle = (A^{-1}(\vec{q})\vec{p})_i, \quad (1)$$

wobei e_i der i -te Einheitsvektor ist; sowie

$$\vec{p}_i' = -\frac{\partial h}{\partial q_i} = -\frac{1}{2} \left\langle \frac{\partial A^{-1}(\vec{q})}{\partial q_i} p_i | p_i \right\rangle. \quad (2)$$

Die Gleichung (1) ist natürlich äquivalent zu $\vec{q}' = A^{-1}(\vec{q})\vec{p}$, genau die Identität die wir zur Definition des Impulses verwendet haben.

Beispiel 4.1 (Doppelpendel). Ein Teilchen A mit Masse 1 ist an einem Stab der Länge mit dem Nullpunkt O in \mathbb{R}^2 verbunden. Ein zweites Teilchen B , ebenfalls mit Masse 1, ist an einem Stab der Länge mit Teilchen A verbunden. Wir berechnen die Bewegungsgleichung als geodätischen Fluss einer Fläche im \mathbb{R}^4 .

Die Parameter q_1 und q_2 seien die Winkel der Einheitsvektoren \vec{OA} und \vec{AB} . Die Punkt A in der Ebene hat dann Koordinaten $(\cos(q_1), \sin(q_1))$, und der Punkt B hat Koordinaten $(\cos(q_1) + \cos(q_2), \sin(q_1) + \sin(q_2))$. Die Geschwindigkeiten sind für Punkt A gleich $q_1'(-\sin(q_1), \cos(q_1))$ und für B gleich $q_1'(-\sin(q_1), \cos(q_1)) + q_2'(-\sin(q_2), \cos(q_2))$. Die gesamte kinetische Energie berechnet sich aus

$$\begin{aligned} 2h &= \dot{q}_1^2 + \left(\dot{q}_1^2 + 2\dot{q}_1\dot{q}_2 \left\langle \begin{pmatrix} -\sin(q_1) \\ \cos(q_1) \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} -\sin(q_2) \\ \cos(q_2) \end{pmatrix} \right\rangle + (\dot{q}_2)^2 \right) \\ &= 2\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2 + 2\dot{q}_1\dot{q}_2 \cos(q_1 - q_2). \end{aligned}$$

Das entspricht der Länge des Geschwindigkeitsvektors der Parametrisierung

$$\alpha : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^4, (q_1, q_2) \mapsto (\cos(q_1), \sin(q_1), \cos(q_1) + \cos(q_2), \sin(q_1) + \sin(q_2)).$$

Für die symmetrische Matrix A und ihre Inverse haben wir

$$A = \begin{pmatrix} 2 & \cos(q_1 - q_2) \\ \cos(q_1 - q_2) & 1 \end{pmatrix}, A^{-1} = \frac{1}{2 - \cos^2(q_1 - q_2)} \begin{pmatrix} 1 & -\cos(q_1 - q_2) \\ -\cos(q_1 - q_2) & 2 \end{pmatrix}.$$

Die Bewegungsgleichungen erhält man durch Einsetzen in die Gleichungen (1) und (2).

Will man die Gleichungen eines Doppelpendels unter dem Einfluß der Schwerkraft bzw. eines Potentialfeldes untersuchen, dann muss man nur einen Term für die potentielle Energie zu h addieren. Das Doppelpendel unter dem Einfluss der Schwerkraft zeigt übrigens chaotisches Verhalten: siehe https://en.wikipedia.org/wiki/Double_pendulum#/media/File:Trajektorie_eines_Doppelpendels.gif.

Übung 4.4. Die drei Teilchen A, B, C haben Masse 1 und bewegen sich ohne Einfluss von äußeren Kräften. Teilchen A ist mit den beiden anderen Teilchen jeweils durch einen Stab der Länge 1 verbunden. Man stelle die Bewegungsgleichung auf (geodätische Bewegung auf einer 4-dimensionalen Mannigfaltigkeit im \mathbb{R}^6).

Der große Vorteil der Hamilton-Mechanik ist nicht unbedingt eine leichtere Lösbarkeit der Bewegungsgleichungen (hier ist manchmal die direkte Newton-Methode einfacher), sondern dass es erleichtert wird, Erhaltungsgrößen zu finden. Eine Erhaltungsgröße für das Hamilton-Vektorfeld $H = i^{-\omega}(h)$ ist eine Funktion f mit $\{f, h\} = 0$.

Im Beispiel 4.1 gilt offensichtlich $h(p_1, p_2, q_1, q_2) = h(p_1, p_2, q_1 + t, q_2 + t)$, d.h. die Hamilton-Funktion ist invariant unter dem Vektorfeld $(0, 0, 1, 1) = i^{-\omega}(d(p_1 + p_2))$. Das bedeutet, dass die Funktion $p_1 + p_2$ eine Erhaltungsgröße ist: der Gesamt-Drehimpuls. Zusammen mit der Hamilton-Funktion hat man hier schon 2 unabhängige Erhaltungsgrößen.

Definition 4.5. Es sei $U \subset \mathbb{R}^{2m}$ und $\omega \in \Omega^2(U)$ eine symplektische Form. Ein Hamilton-Vektorfeld $H = i^{-\omega}(h)$ heißt *vollständig integrabel*, wenn m Funktionen f_1, \dots, f_m existieren, sodaß

- die Gradienten df_1, \dots, df_m linear unabhängig sind;
- die Funktionen Erhaltungsgrößen sind, d.h. $\{f_i, h\} = 0$ für $i = 1, \dots, m$;
- die Poisson-Klammern $\{f_i, f_j\}$ alle gleich 0 sind für $i, j = 1, \dots, m$.

Lokal gibt es wegen dem Satz von Darboux (erweiterte Version) für jeden Punkt x_0 mit $H(x_0) \neq 0$ eine Umgebung, auf der h vollständig integrabel ist. Im Fall $m = 1$ hat man vollständige Integrabilität auf der offenen Menge aller Punkte, die keine Equilibrien sind (warum?).

Bemerkung 4.6. Wenn $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ eine Erhaltungsgröße ist, dann ist auch f^2 eine Erhaltungsgröße. Diese Erkenntnis bringt aber nichts für die Integrabilität, weil der Gradient von f^2 in jedem Punkt ein Vielfaches vom Gradient von f ist.

Übung 4.7. Man zeige, daß die Hamilton-Funktion in Beispiel (4.1) vollständig integrabel ist auf der offenen Menge $p_1^2 + p_2^2 \neq 0$.

Man kann zeigen, daß es keine $m + 1$ Funktionen mit linear unabhängigen Gradienten geben kann, deren Poisson-Klammer paarweise Null ist.

Sei $H = i^{-\omega}(h)$ eine vollständig integrables Hamilton-Vektorfeld. In dieser Situation kann man den Fluss topologisch recht gut beschreiben. Es sei $\phi : U \rightarrow \mathbb{R}^m$ die Abbildung (f_1, \dots, f_m) . Da die f_i alle erhalten bleiben, bewegen sich die Flüsse in den Urbildern von Punkten von ϕ (auch bezeichnet als "Fasern" von ϕ). Man kann mit Methoden der Differentialgeometrie zeigen, daß diese Fasern immer Dimension m haben.

Es sei nun $Y \subset U$ eine solche Faser und $y_0 \in Y$. Es seien $F_1 := i^{-\omega}(f_1), \dots, F_m := i^{-\omega}(f_m)$. Dann ist die mehrdimensionale Fluss-Abbildung

$$\rho : D \subset \mathbb{R}^m \rightarrow Y, (t_1, \dots, t_m) \rightarrow \phi_{F_1}(t_1, \phi_{F_2}(t_1, \dots, \phi_{F_m}(t_m, y_0) \dots))$$

lokal invertierbar, weil die Jacobi-Determinante eine Matrix ist, in deren Spalten die Vektorfelder F_1, \dots, F_m stehen, und die sind linear unabhängig. Es sei $Z \in D$ die Menge aller Punkte u , für die $\rho(u) = y_0$ ist. Aus der uns bekannten Eigenschaft des Flusses $\phi(s, \phi(t, x)) = \phi(s + t, x)$ und aus der Vertauschbarkeit der Flüsse folgt, dass $\rho(u_1) = \rho(u_2) \Leftrightarrow u_1 - u_2 \in Z$ gilt. Außerdem ist Z ein \mathbb{N} -Modul: die Summe bzw. Differenz zweier Elemente in Z liegt wieder in Z . Das Bild, das sich daraus ergibt, ist die Parametrisierung eines Zylinders oder Torus.

Die Flüsse von F_1, \dots, F_m sind im Parameter-Raum D linear. Die Hamilton-Funktion h hängt nur von den Werten von f_1, \dots, f_m ab, also ist der Gradient eine Linearkombination der Gradienten der f_i , und der Fluss von H ist im Parameterraum ebenfalls linear. Die Bahnen in U sind dann Bilder von Geraden unter den Torus- oder Zylinder-Parametrisierungen. Sie können periodisch sein, aber auch dicht im Torus liegen.

Beispiel 4.2. Wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden, wird das Pendel auf einer Kugel im Schwerfeld durch ein vollständig integrables Vektorfeld beschrieben. Die Bahnen – Bilder von Geraden im Torus, manchmal periodisch, aber meistens dicht mit einer gewissen Regelmäßigkeit – kann man sich gut vorstellen, wenn man einen schweren Gegenstand an einem dünnen Faden anbindet und anstupst. Oder man sieht sich die Animation <http://www.ialms.net/sim/3d-pendulum-simulation/> an (am besten Show trajectory aktivieren).

5 Der Drehimpuls

Wir betrachten ein Teilchen mit Masse 1, das sich in der Ebene \mathbb{R}^2 in einem Potentialfeld bewegt; und zwar so, dass das Potential nur von der Entfernung vom Mittelpunkt abhängt. Wir beschreiben die Bewegung in Polarkoordinaten q_r, q_ϕ . Die kinetische Energie berechnen wir wie beim geodätischen Fluss. Die Jacobi-Matrix der Abbildung $(q_r, q_\phi) \mapsto (q_r \cos(q_\phi), q_r \sin(q_\phi))$ ist $J = \begin{pmatrix} \cos(q_\phi) & -r \sin(q_\phi) \\ \sin(q_\phi) & r \cos(q_\phi) \end{pmatrix}$.

$$k = \frac{1}{2} \left\langle J \begin{pmatrix} \dot{q}_r \\ \dot{q}_\phi \end{pmatrix} \mid J \begin{pmatrix} \dot{q}_r \\ \dot{q}_\phi \end{pmatrix} \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle \begin{pmatrix} \dot{q}_r \\ \dot{q}_\phi \end{pmatrix} \mid J^T J \begin{pmatrix} \dot{q}_r \\ \dot{q}_\phi \end{pmatrix} \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle \begin{pmatrix} \dot{q}_r \\ \dot{q}_\phi \end{pmatrix} \mid A \begin{pmatrix} \dot{q}_r \\ \dot{q}_\phi \end{pmatrix} \right\rangle = \frac{\dot{q}_r^2 + q_r^2 \dot{q}_\phi^2}{2},$$

wobei $A = J^T J = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & q_r^2 \end{pmatrix}$ ist. Um die Standard-Form zu erhalten, definieren wir die Impulskordinaten durch Multiplikation des Geschwindigkeitsvektors mit A : $p_r := \dot{q}_r$ und $p_\phi := q_r^2 \dot{q}_\phi$. Die potentielle Energie ist $u(q_r)$. Die Hamilton-Funktion ist daher

$$h(p_r, p_\phi, q_r, q_\phi) = k + u = \frac{\dot{q}_r^2 + q_r^2 \dot{q}_\phi^2}{2} + u(q_r).$$

Nachdem die Hamilton-Funktion nicht von q_ϕ abhängt, ist $\{h, p_\phi\} = -\frac{\partial h}{\partial q_\phi} = 0$, das heißt p_ϕ ist eine Erhaltungsgröße: der Drehimpuls in der Ebene. Das dazugehörige Vektorfeld

$$P_\phi : U \rightarrow \mathbb{R}^4, (p_r, p_\phi, q_r, q_\phi) \mapsto (0, 1, 0, 0)$$

beschreibt die Rotation um den Nullpunkt. Im obigen Beispiel bleiben sowohl die symplektische Form als auch die Hamilton-Funktion durch Rotation um den Nullpunkt erhalten, die Rotation ist also eine Symmetrie und der Drehimpuls ist die entsprechende Erhaltungsgröße.

Wir wollen den Drehimpuls von 3-dimensionalen Bewegungen beschreiben und auf die Berechnung der Bewegung eines starren Körpers ohne Einfluss von äusseren Kräften anwenden. Wir nehmen an, dass der Schwerpunkt unbewegt ist, also die Bewegung durch eine Funktion von der Zeit in die spezielle orthogonale Gruppe $SO(3)$. Das ist eine drei-dimensionale Mannigfaltigkeit. Für die Parametrisierung gibt es verschiedene Möglichkeiten (Euler-Koordinaten, gyroskopisch, Exponential-Abbildung). Keine davon ist ganz einfach, aber für unsere Rechnung ist die genaue Wahl der Koordinaten nicht wichtig. Jedenfalls haben wir eine differenzierbare Parametrisierung, die jedem Tripel (q_1, q_2, q_3) eine Matrix $R(q_1, q_2, q_3)$ zuordnet mit $R^T R = I_3$. Die Jacobi-Matrix sei $J(\vec{q})$. Für $\vec{q} \in \mathbb{R}^3$ ist $J(\vec{q}) \cdot \vec{q}$ eine 3×3 -Matrix $\dot{R}(\vec{q}, \vec{q})$, weil auch die Funktion R matrix-wertig ist. Sie hängt linear von \vec{q} ab.

Es sei $U(\vec{q}, \vec{q}) := R^{-1}(\vec{q}) \dot{R}(\vec{q}, \vec{q})$. Diese Matrix ist schief-symmetrisch (Beweis Übung?). Sie kann daher als Linearkombination der drei Matrizen

$$I_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, I_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, I_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

geschrieben werden, mit Koeffizienten $x(\vec{q}, \vec{q}), y(\vec{q}, \vec{q}), z(\vec{q}, \vec{q})$. Der starre Körper besteht aus Punkten an den Stellen $a_1, \dots, a_N \in \mathbb{R}^3$ mit Massen m_1, \dots, m_N . Die kinetische Energie ist

$$h(\vec{q}, \vec{q}) = \frac{\sum_{i=1}^N \langle \dot{R} a_i \mid \dot{R} a_i \rangle}{2} = \frac{\sum_{i=1}^N \langle a_i \mid U^T U a_i \rangle}{2}.$$

Diesen Ausdruck können wir als $\frac{\langle(x,y,z)|\Theta(x,y,z)\rangle}{2}$ schreiben, mit einer 3×3 -Matrix Θ , die nur von den m_i und den a_i abhängt. Man nennt diese Matrix den Trägheitstensor des starren Körpers.

Die skalaren Funktionen x, y, z hängen ja von $\vec{q}, \dot{\vec{q}}$ an, und in $\dot{\vec{q}}$ sind sie linear. (Man nennt den Vektor (x, y, z) auch die Winkelgeschwindigkeit.) Daher ist $h(\vec{q}, \dot{\vec{q}})$ von der Form $\frac{1}{2}\langle A(\vec{q})\dot{\vec{q}}|\dot{\vec{q}}\rangle$. Mit anderen Worten, wir haben es wieder einmal mit einem geodätischen Fluss zu tun.

Die Metrik, die durch h auf $SO(3)$ definiert wird, hat eine besondere Eigenschaft: sie ist invariant unter Multiplikationen von speziellen orthogonalen Matrizen von links. Wenn man die Parametrisierung $R : \mathbb{R}^3 \rightarrow SO(3)$ mit der Linksmultiplikation $\lambda_S : X \mapsto SX$ verknüpft, ändern sich die Längen von Kurven nicht, weil sich schon bei der Berechnung von U das S herauskürzt (also, die Koordinatenfunktionen $x, y, z : U \rightarrow \mathbb{R}$ sind schon linksinvariant). Es sei seien $L_x, L_y,$ und L_z die Vektorfelder, deren Flüsse die Multiplikation mit $e^{tI_x}, e^{tI_y}, e^{tI_z}$ von links sind. Dann sind diese Vektorfelder wieder Symmetrien. Die entsprechenden Funktionen sind dann Erhaltungsgrößen $l_x, l_y, l_z : U \rightarrow \mathbb{R}$. Und die vektorwertige Funktion (l_x, l_y, l_z) nennen wir den Drehimpuls.

Bemerkung 5.1. Die Metrik h ist im allgemeinen nicht rechtsinvariant, ausser wenn das Trägheitsmoment ein Vielfaches der Einheitsmatrix ist.

All das hilft uns allerdings erst dann weiter, wenn wir wissen, wie man den Drehimpuls als Funktion von \vec{q} und $\dot{\vec{q}}$ berechnen kann. Ein allgemeiner Satz über geodätische Flüsse auf Gruppen hilft hier weiter.

Satz 5.1. *Es sei G eine Gruppe der Dimension m . Es sei $V \in \mathbb{R}^m$ und $R : V \rightarrow G$ eine differenzierbare Parametrisierung. Es sei $U := V \times \mathbb{R}^m$ der Hamilton-Phasenraum. Es sei $h : U \rightarrow \mathbb{R}, (\vec{q}, \dot{\vec{q}}) \mapsto \langle \dot{\vec{q}} | A(\vec{q})\dot{\vec{q}} \rangle$ eine linksinvariante Metrik. Es sei $B_{\vec{q}}$ die Jacobi-Matrix der Multiplikation mit $R(\vec{q})$ von rechts. Dann ist die vektorwertige Funktion*

$$L : U \rightarrow \mathbb{R}^m, (\vec{q}, \dot{\vec{q}}) \mapsto A(\vec{q})B_{\vec{q}}^T \dot{R}(\vec{q}, \dot{\vec{q}})$$

eine vektorwertige Erhaltungsgröße.

Anstatt eines Beweises schauen wir uns ein Beispiel an, bei dem man die Behauptung des Satzes leichter überprüfen kann.

Beispiel 5.2. Es sei $G = \mathbb{R}^* \times \mathbb{R}$ mit Gruppenmultiplikation $(m_1 \cdot m_2)(q_1, q_2) := (m_1 q_1, m_1 q_2 + m_2)$. Hier ist $G \subset \mathbb{R}^2$ und wir können die Identität als Parametrisierung nehmen.

Als Metrik wählen wir $h(q_1, q_2, \dot{q}_1, \dot{q}_2) = \frac{\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2}{q_1^2}$. Die Multiplikation von links mit (m_1, m_2) schlägt sich im Phasenraum so nieder: $(q_1, q_2, \dot{q}_1, \dot{q}_2) \mapsto (m_1 q_1, m_1 q_2 + m_2, m_1 \dot{q}_1, m_1 \dot{q}_2)$. Wegen

$$\frac{(m_1 \dot{q}_1)^2 + (m_1 \dot{q}_2)^2}{(m_1 q_1)^2} = \frac{\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2}{q_1^2}$$

ist die Metrik linksinvariant.

Die Multiplikation von rechts ist eine lineare Abbildung, also ist sie gleich ihrer Jacobi-Matrix:

$B(\vec{q}) = \begin{pmatrix} q_1 & 0 \\ q_2 & 1 \end{pmatrix}$. Wir erhalten daher für den ‘‘Drehimpuls’’

$$(l_1, l_2) = \frac{1}{q_1^2}(q_1 \dot{q}_1 + q_2 \dot{q}_2, \dot{q}_2) = \left(\frac{q_1 \dot{q}_1 + q_2 \dot{q}_2}{q_1^2}, \frac{\dot{q}_2}{q_1^2} \right).$$

Um die Poisson-Klammern mit h zu berechnen, transformieren wir in Impulskordinaten $p_1 = \frac{\dot{q}_1}{q_1}, p_2 = \frac{\dot{q}_2}{q_1^2}$:

$$l_1 = p_1 q_1 + p_2 q_2, \quad l_2 = p_2, \quad h = q_1^2(p_1^2 + p_2^2)$$

und finden $\{h, l_1\} = \{h, l_2\} = 0$, in Übereinstimmung mit der Behauptung des Satzes.

Für fixen Drehimpuls (l_1, l_2) erhalten wir ein Vektorfeld in V , das man mit dem script `vector.py` visualisieren kann. Man sieht, dass die geodätischen Kreise mit Mittelpunkt auf der q_2 -Achse sind. Kann man das auch mathematisch begründen (ohne die Differentialgleichung zu lösen)?

Bemerkung 5.2. Die Koordinaten des Drehimpulses erzeugen einen m -dimensionalen Vektorraum, der abgeschlossen ist unter der Poisson-Klammer. Zum Beispiel gilt im Beispiel oben: $\{l_1, l_2\} = l_2$.

Zurück zu unserem starren Körper im \mathbb{R}^3 , also $G = SO(3)$. Hier erhalten wir einen Drehimpuls mit 3 Koordinaten. In der Animation <http://www.ialms.net/sim/3d-rigid-body-simulation/> kann man verschiedene Dinge anzeigen lassen.

- Die Metrik wird dargestellt durch ein Ellipsoid. Sie dreht sich mit dem Holzblock mit. Allgemein sind die Dinge, die sich mit dem Holzblock mitdrehen, links-invariant, und die Dinge die fest bleiben rechtsinvariant.
- Der Drehimpuls ist rechtsinvariant und bleibt fix.
- Die Winkelgeschwindigkeit im fixen Koordinatensystem (rechtsinvariant) hat ein konstantes Skalarprodukt mit dem Drehimpuls (Resultat ist $2h$). Daher bewegt sich die Winkelgeschwindigkeit in einer Ebene normal zum Drehimpuls. Die Ebene bleibt fix.
- Der Koordinaten des Drehimpulses im sich mitdrehenden Koordinatensystem sind nicht konstant, aber der Koordinatenwechsel erhält die Länge. Im sich mitdrehenden Koordinatensystem ist aber der Drehimpuls gleich Θ mal der Winkelgeschwindigkeit, also bewegt sich die Winkelgeschwindigkeit auf einem Ellipsoid, die sich mitdreht (es ist das gleiche Ellipsoid, das schon oben erwähnt ist).
- Die Koordinaten der Winkelgeschwindigkeit folgen einer geschlossenen Kurve auf dem Ellipsoid.

Die Erklärung für den letzten Punkt ist die folgende: Für die Koordinaten ω_l der Winkelgeschwindigkeit im sich mitdrehenden Koordinatensystem haben wir zwei quadratische Gleichungen, deren Nullstellen Ellipsoide sind. Eines ist die schon oben erwähnte $\langle \Theta \omega_l, \Theta \omega_l \rangle = \text{constant}$. Die zweite ist $\langle \omega_l, \Theta \omega_l \rangle = 2h = \text{constant}$. Die geschlossene Kurve ist der Schnittpunkt der beiden Ellipsoide. Die Teilmenge des Phasenraums, bei denen alle vier Erhaltungsgrößen konstant sind, ist im allgemeinen eine algebraische Fläche, die man also Teilmenge von $SO(3)$ sehen kann. Die Bewegung ist eine geodätische Kurve auf dieser Fläche. Die Berechnung dieser Fläche ist noch zu machen. Das wäre das Thema einer Bachelor-Arbeit.

Übung 5.3. Ist das Hamilton-System von der freien Bewegung eines starren Körpers vollständig integrabel?

6 Quantenmechanik

Der erste Schritt von der Hamilton-Mechanik zur Quantenmechanik ist eine “Reduktion auf das Wesentliche”. Koordinaten und Funktionen werden zum Oberbegriff “Observable” zusammengefasst und nicht weiter unterschieden. Zu jeder Observablen gehört ein Vektorfeld - in der Quantenmechanik wird gar nicht mehr zwischen den beiden unterschieden und die Observable werden mit Großbuchstaben bezeichnet. Es gibt eine spezielle Observable H , die Hamiltonian. Die zeitliche Änderung der Observablen F , also das was man eine gewisse Zeit später observieren könnte, wird in der Hamilton-Mechanik durch das Axiom $F' = \{F, H\}$ geregelt. Die Poisson-Klammer ist bilinear, antikommutativ und erfüllt die Jacobi-Identität; so eine algebraische Struktur nennen wir auch eine *Lie Algebra*. Die Leibniz-Regel lassen wir derweil sausen. Heisenberg und Schrödinger ersetzen die Poisson-Klammer durch eine andere Operation; diese ist ebenfalls eine Lie Algebra und eigentlich einfacher:

Es sei \mathcal{H} ein Hilbert-Raum über \mathbb{C} und $\mathcal{O}_{\mathbb{C}}$ ein \mathbb{C} -Vektorraum von Operatoren $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, die abgeschlossen ist bezüglich Hintereinanderausführung und Bildung des adjungierten Operators. Wir nennen einen Operator *reell*, wenn er selbstadjungiert ist, $A^* = A$ erfüllt; die Menge dieser Operatoren ist $\mathcal{O}_{\mathbb{R}}$. Jeder komplexe Operator läßt sich eindeutig schreiben als reeller Operator

plus i mal einem reellen Operator Unsere Lie-Algebra ist die Abbildung $(A, B) := -i[A, B] = -i(AB - BA)$. Man kann zeigen, daß $\mathcal{O}_{\mathbb{R}}$ abgeschlossen ist bezüglich Addition, Multiplikation mit reellen Zahlen, Iteration, und der Lie-Algebra-Struktur; allerdings nicht bezüglich Hintereinanderausführung (das ist der Grund warum wir mit der Produktregel nicht so viel anfangen kann).

Anstelle des Hamilton-Axioms tritt die Schrödinger-Gleichung

$$\phi'(t) = -iH\phi(t),$$

wobei $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{H}$ die zeitliche Entwicklung eines Systems ist, das für jeden Zeitpunkt durch einen "Zustandsvektor" $\phi(t)$ beschrieben wird. Der Hamiltonian H ist ein reeller Operator. Übung: man zeige, daß $t \mapsto \langle \phi(t), \phi(t) \rangle$ für jede Lösung eine Konstante ist. Zwischen zwei Zuständen ϕ_1 und $c\phi_1$ will man nicht unterscheiden, deshalb nehmen wir an, dass der Zustand ein Einheitsvektor ist.

Die Schrödingergleichung ist eine gewöhnliche Differentialgleichung, die leicht zu lösen ist: $\phi(t) = e^{-iH}(\phi_0)$. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$H\phi = \lambda\phi$$

ist die Bestimmung der Eigenwerte und Eigenvektoren von H (ein Problem der linearen Algebra). Wenn $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ die Eigenwerte sind, dann lässt sich jede Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung schreiben als

$$\phi(t) = \sum_{i=1} e^{-i\lambda_i t} \phi_i$$

mit $\phi_i \in H_{\lambda_i}$, dem Eigenraum zu λ_i . (Wieso gibt es keine größeren Jordan-Blöcke?)

Beispiel 6.1. Die drei Komponenten des Drehimpulses erfüllen die Gleichungen

$$\{l_x, l_y\} = l_z, \{l_x, l_z\} = -l_y, \{l_y, l_z\} = l_x.$$

Diese 3-dimensionale Lie-Algebra gibts aber auch viel billiger. Als Hilbertraum \mathcal{H} nehmen wir \mathbb{C}^2 . Die Menge der Operatoren ist $\mathcal{O}_{\mathbb{C}} = \mathbb{C}^{2 \times 2}$. Sie wird erzeugt von I_2 und den Operatoren:

$$L_x := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, L_y := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, L_z := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Die Eigenwerte sind in allen drei Fällen $\pm \frac{1}{2}$. Die Eigenvektoren von L_z sind leicht zu berechnen. Im Fall von L_z haben wir $\phi_+ = (1, 0)$ und $\phi_- = (0, 1)$. Falls L_z der Hamiltonian ist, haben wir die folgende Lösung der Schrödinger-Gleichung:

$$\phi(t) = a_+ e^{-it/2} \phi_+ + a_- e^{it/2} \phi_-,$$

wobei $a_+, a_- \in \mathbb{C}$ Konstanten sind mit $|a_+|^2 + |a_-|^2 = 1$. Wenn zum Beispiel $a_+ = a_- = \sqrt{\frac{1}{2}}$ ist, dann schwingt die Lösung periodisch in einem Kreis herum, auf denen die Eigenvektoren von L_x und L_y liegen.

Das Verhalten dieses dynamischen Systems ist ähnlich wie bei eine kugelförmigen Körper mit Trägheitstensor $\Theta = I_3$ ohne äussere Kräfte. Nur dass es hier viel weniger Observable gibt.

Solange nichts gemessen wird, ist die Quantenmechanik ein ganz normales und (wie im obigen Beispiel) sogar sehr einfaches dynamisches System. Die Messungen machen die Theorie allerdings dann doch wieder kompliziert. Für diese gibt es folgende Axiom der Quantenmechanik.

- Jede Messung erfolgt zu einem bestimmten Zeitpunkt t .
- Das Resultat einer Messung ist eine reelle Zahl. Diese Zahl ist ein Eigenwert der gemessenen Observablen.

- Der Zustand $\phi(t)$ bestimmt die Wahrscheinlichkeit, mit der die verschiedenen Eigenwerte als Messresultate auftreten. Wenn $\phi(t) = \sum_{i=1}^n a_i \phi_i$ ist, dann ist die Wahrscheinlichkeit für Messresultat λ_i gleich $|a_i|^2$.

Im letzten Punkt nehmen wir an, dass ϕ_i ein Einheitsvektor im Eigenraum A_{λ_i} ist. Die Eigenwerte von selbstadjungierten Operatoren sind übrigens immer reell, und die Einheitsvektoren verschiedener Eigenwerte stehen normal aufeinander. Es folgt $\sum_{i=1}^n |a_i|^2 = 1$ (wie es sich für Wahrscheinlichkeiten gehört).

Im Beispiel (6.1) treten als mögliche Resultate für den Drehimpuls Richtung z nur zwei Werte auf, $\pm \frac{1}{2}$. Wenn der Zustand ein Eigenvektor von L_z ist, dann wird mit Wahrscheinlichkeit 1 der entsprechende Eigenwert gemessen. Wenn der Zustand ein Eigenvektor von L_x oder von L_y ist, dann die Chancen für jedes der beiden Ergebnisse 50:50.

Wenn unmittelbar nach der Messung von L_z - sagen wir, das Resultat war gleich $+\frac{1}{2}$ - eine nochmalige Messung von L_z vorgenommen wird, tritt dasselbe Ergebnis mit Sicherheit noch einmal auf. Daraus folgt, dass der Zustand nach einer Messung ein Eigenvektor des gemessenen Eigenwerts ist.

Als pragmatischer Forscher könnte man die Axiom einfach akzeptieren, Beispiele rechnen und versuchen, sie durch Experimente nachzuweisen. Einem nachdenkenden Student/einer nachdenkenden Studentin stößt es aber an dieser Stelle doch einige Fragen auf.

1. Kann man Messungen nicht durch bloßes Beobachten machen, ohne die Zustände zu verändern? Ist das überhaupt noch "Messen" oder schon eher ein Zerstören von dem, was man eigentlich messen wollte?
2. Gibt man durch das Akzeptieren von Wahrscheinlichkeits-Aussagen nicht den Anspruch der Physik auf, das Verhalten punktgenau vorherzusagen bzw. zu beschreiben?
3. Sobald der experimentierende Physiker/die experimentierende Physikerin das Messresultat erblickt, wird doch die Wahrscheinlichkeit zur Sicherheit, oder? Wenn ja, dann hätten psychologische Wahrnehmungsvorgänge einen Einfluss auf die Physik. Wann genau soll dieser Übergang Wahrscheinlichkeit \rightarrow Sicherheit stattfinden? Wenn der Lichtstrahl des Messergebnisses das Auge trifft oder wenn der Impuls im Gehirn ankommt?

Viele Bücher sind über diese Fragen geschrieben worden, und man kann sie nicht billig hinwegwischen. Die folgenden Antworten sind eine persönliche Auswahl; es besteht kein Mangel an abweichenden Erklärungen.

1. In der Quantenmechanik kann man nur selten Messungen vornehmen, ohne den Zustand zu verändern. Beim überwiegenden Teil der Messungen kann man zeigen dass eine Störung von mindestens der oder der Größenordnung auftreten muss. Man versucht zwar, die Störung so klein wie möglich zu halten, aber es gibt ein Minimum an notwendiger Störung für eine Messung. Dieses Minimum hängt vom Zustand und von der Observablen ab. Wenn der Zustand eines Elementarteilchen gerade Wellencharakter hat, muss man stark stören wenn man eine Teilchen-Frage stellen will; und umgekehrt.
2. Theoretisch ja, das Akzeptieren von Wahrscheinlichkeits-Aussagen statt sicheren Aussagen ist ein Abstrich. Allerdings ist die Anzahl der Versuchswiederholungen, die man machen kann, enorm hoch (Größenordnung 1 durch die Boltzmannkonstante), sodass die numerischen Werte dieser Wahrscheinlichkeiten bei weitem genauer sind also die Ergebnisse bei klassischen Versuchen.
3. Wahrscheinlichkeiten sind grundsätzlich subjektiv, insbesondere in der Quantenmechanik. Die Wahrscheinlichkeit für das Eintreten eines gewissen Ereignisses hängt von meinem Wissenstand ab. Wenn mein Auge ein Messergebnis erblickt, hat sich das Ergebnis nicht verändert, aber mein Wissenstand darüber.

Die Erklärung von Frage 3 wird durch ein berühmtes Gedankenexperiment illustriert: Theoretisch ist es möglich, durch zerfallende Elektronen, die das Herabfallen eines Hammers mit einer Giftflasche auslösen, einen quantenmechanischen Zustand zu erzeugen, in dem Schrödingers Katze "halb tot und halb lebendig" ist, mit prinzipiell messbaren Interferenz-Erscheinungen der toten und der lebendigen Katze. Erst wenn Schrödinger das Fenster zur Stahlkammer öffnet und renschaut, ist die Katze entweder ganz lebendig oder ganz tot.

Würde statt der Katze ein Physikerkollege in der Stahlkammer sitzen (das Gift lassen wir dann besser weg!), dann würde dieser eine andere Wellenfunktion und vor allem eine andere Wahrscheinlichkeit wahrnehmen. Er hat ja auch ein anderes quantenmechanisches System vor sich: nur das Elektron und den Hammer, während Schrödingers System eine Verschränkung des Elektrons, des Hammer und des Kollegen ist.

Wir wollen aber vorläufig die quantenmechanischen Axiome akzeptieren und ein Beispiel rechnen, nämlich das bereits begonnen Beispiel 6.1. Dieses ist übrigens das einfachste quantenmechanische System überhaupt, bekannt unter dem Namen *Qubit*.

Bemerkung 6.1. Das System beschreibt den Drehimpuls eines Elektrons. Er lässt sich messen, weil das Magnetfeld eines Silberatoms nur vom Spin eines einzigen Elektrons abhängig ist.

Es sei $A : \mathbb{C}^2 \rightarrow \mathbb{C}^2$ eine reelle Observable mit Eigenwerten $\lambda_1 < \lambda_2$ (wenn beide Eigenwerte gleich sind, hat man immer das gleiche Ergebnis, nicht interessant). Es kommt auf das gleiche hinaus, ob man A oder $\alpha A + \beta$ für irgendwelche $\alpha \in \mathbb{R}^*$, $\beta \in \mathbb{R}$ misst. Drum können wir uns ohne Beschränkung der Allgemeinheit auf Observable mit Eigenwerten $\pm \frac{1}{2}$ beschränken.

Proposition 6.2. Jede soche Observable lässt sich eindeutig schreiben als $xL_x + yL_y + zL_z$ mit $x, y, z \in \mathbb{R}$, $x^2 + y^2 + z^2 = 1$. Wir bezeichnen diese Observable als L_u , wobei $u \in \mathbb{R}^3$ der Einheitsvektor (x, y, z) ist.

Beweis. Zusammen mit I_3 bilden L_x, L_y, L_z eine Basis für \mathcal{O} . I_3 ist das einzige Basiselement mit Spur ungleich 0, und A hat ebenfalls Spur 0, also weg mit I_3 . Die Determinante von $xL_x + yL_y + zL_z$ ist $-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{4}$, und das muss gleich $-\frac{1}{4}$ sein. \square

Proposition 6.3. Für jeden Zustand $\phi \in \mathbb{C}^2$ gibt es genau einen Einheitsvektor u sodass $L_u \phi = \frac{1}{2} \Phi$ ist.

Beweis. Es sei $\psi \in \mathbb{C}^2$ ein Einheitsvektor orthogonal zu ϕ . Wir definieren

$$L : \mathbb{C}^2 \rightarrow \mathbb{C}^2, u \mapsto \frac{1}{2} \langle \phi | u \rangle \phi - \frac{1}{2} \langle \psi | u \rangle \psi,$$

dann hat L die richtigen Eigenwerte und geht als L_u durch. Die Eindeutigkeit folgt aus der nächsten Proposition. \square

Proposition 6.4. Es seien u, v Einheitsvektoren in \mathbb{R}^3 . Es sei ϕ_u ein Eigenvektor von L_u zum Eigenwert $\frac{1}{2}$. Dann ist die Wahrscheinlichkeit, dass bei einer Messung von L_v auch $\frac{1}{2}$ herauskommt, gleich $\frac{1 + \langle u, v \rangle}{2}$; das ist der Kosinus-Quadrat der Hälfte des eingeschlossenen Winkels.

Diesen Beweis lassen wir aus. - Die Eindeutigkeit davor ist dann leicht: wenn ϕ Einheitsvektor zu L_u und L_v ist, beidesmal mit Eigenwert $\frac{1}{2}$, dann ist die Wahrscheinlichkeit, dass bei der Messung von L_v der Wert $\frac{1}{2}$ herauskommt, gleich 1. Daher ist der eingeschlossene Winkel 0 und es folgt $u = v$.

Aus Proposition 6.4 folgt auch $\langle \phi_u | \phi_v \rangle \Leftrightarrow v = -u$: der eingeschlossene Winkel ist dann π .

Die Zustände, die zu den Einheitsvektoren auf den Koordinatenachsen gehören, kann man leicht berechnen:

$$\phi_x = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \phi_{-x} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}} \\ -\sqrt{\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \phi_y = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}} \\ i\sqrt{\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \phi_{-y} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}} \\ -i\sqrt{\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \phi_z = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \phi_{-z} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

7 Verschränkung

Zwei Qubits sind zwei Elektronen, auf die keine Kräfte wirken und die auch einander nicht beeinflussen. In diesem zusammengesetzten System existieren Zustände, in denen die beiden Elektronen nicht mehr voneinander getrennt betrachtet werden können, um das Verhalten unter Messungen zu verstehen. Im Konzept der Quantencomputer manipuliert man so einem System durch bestimmte unitäre Operatoren. Motiviert ist das dadurch, dass die Lösung der Schrödinger-Gleichung (also e^{-itH}) ein unitärer Operator ist. Solche unitären Manipulationen könnten also im Labor durchgeführt werden. Abschliessend nimmt man eine Messung vor und hat das Ergebnis.

Wir beginnen damit, das System zu beschreiben, dass aus der Summe zweier Systeme besteht. Es seien \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 Hilberträume mit dazugehörigen Observablen-Algebren $\mathcal{O}_1 \in \text{End}(\mathcal{H}_1)$ und $\mathcal{O}_2 \in \text{End}(\mathcal{H}_2)$. Der Hilbertraum von der Summe der zwei Systeme ist das Tensorprodukt $\mathcal{H}_{12} := \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Wenn ϕ_1, \dots, ϕ_m eine Basis für \mathcal{H}_1 ist und ψ_1, \dots, ψ_n eine Basis für \mathcal{H}_2 , dann bilden die mn Vektoren $\phi_i \otimes \psi_j$, $i = 1, \dots, m$, $j = 1, \dots, n$, eine Basis für das Tensorprodukt. Das Skalarprodukt auf \mathcal{H}_{12} ist so definiert, dass die vorige Aussage auch für "ONB" statt "Basis" gilt. Formal setzt man $\langle u_1 \otimes u_2 | v_1 \otimes v_2 \rangle := \langle u_1 | v_1 \rangle \langle u_2 | v_2 \rangle$ für alle zerlegbaren Tensoren. Aus der linearen Algebra ist bekannt, dass sich nicht jeder Vektor zerlegen lässt; aber alle Tensoren sind Summen von zerlegbaren Tensoren.

Es sei $A \in \mathcal{O}_1$ und $B \in \mathcal{O}_2$. Dann ist der Operator $A \otimes B : \mathcal{H}_{12} \rightarrow \mathcal{H}_{12}$ dadurch definiert, dass er jeden zerlegbaren Tensor $a \otimes b$ auf den zerlegbaren Tensor $A(a) \otimes B(b)$ abbildet. Den Vektorraum aller dieser Operatoren wählen wir als die Observablen vom Summensystem. Jede Observable $A \in \mathcal{O}_1$ lässt sich als Observable $A \otimes \text{id}_{\mathcal{H}_2} \in \mathcal{H}_{12}$ deuten, analog für die Observablen in \mathcal{O}_2 . Wie bei den Tensoren gibt es auch in den Observablen solche, die nicht in $A \otimes B$ zerlegt werden können; meistens interessiert man sich aber nur für die zerlegbaren Observablen.

Wir sehen uns hier nur die Summe zweier Qubits an, also wir nehmen, dass $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2 = \mathbb{C}^2$ ist. Wir nennen zwei zerlegbare Zustände $\phi_a \otimes \phi_u$ und $\phi_b \otimes \phi_v$ *doppelt orthogonal*, wenn sowohl die Einheitsvektoren a, b im ersten System also auch die Einheitsvektoren u, v im zweiten System zueinander normal sind.

Nicht zerlegbare Zustände nennen wir *verschränkt*.

Proposition 7.1. *Jeder verschränkte Zustand ϕ lässt sich als Summe von zwei zerlegbaren Zuständen schreiben, die doppelt orthogonal sind. Es gibt zwei mögliche Fälle.*

1. Die Zerlegung $\phi = \phi_1 + \phi_2$ ist eindeutig, und es gilt $\|\phi_1\| \neq \|\phi_2\|$.
2. Es existiert eine lineare Abbildung $\tau : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$, sodass jede Zerlegung in doppelt orthogonale zerlegbare Zustände geschrieben werden kann als $\phi = \phi_1 \otimes f(\phi_2) - \phi_2 \otimes f(\phi_1)$ mit $\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = 0$, modulo einer Multiplikation mit komplexen Skalaren. In diesem Fall nennen wir ϕ maximal verschränkt.

Wir zeigen nur, dass der zweite Fall möglich ist, also dass es maximal verschränkte Zustände im Sinn der obigen Definition gibt. Wir setzen f als die Identität. Es sei $\phi_1 = (z_1, w_1)$ und $\phi_2 = (z_2, w_2)$ Dann ist

$$\phi = \phi_1 \otimes \phi_2 - \phi_2 \otimes \phi_1 = (z_1 w_2 - w_2 z_1)(e_1 \otimes e_2 - e_2 \otimes e_1).$$

Wenn ϕ_1 und ϕ_2 orthogonale Einheitsvektoren sind, dann ist $|z_1 w_2 - w_2 z_1| = 1$. Bis auf diese Konstante hängt das Ergebnis, nämlich $\sqrt{\frac{1}{2}}(e_1 \otimes e_2 - e_2 \otimes e_1)$, nicht von ϕ_1 und ϕ_2 ab. Wir bezeichnen diesen speziellen maximal verschränkten Zustand, für den f die Identität ist, mit ϕ_\times . Maximal verschränkte Zustände haben eine interessante Eigenschaft. Es sei Wenn $u \in \mathbb{R}^3$ ein beliebiger Einheitsvektor. Die Observablen $L_u \otimes I, I \otimes L_u$ haben Eigenwerte $\pm \frac{1}{2}$ (jeweils doppelt), und sie sind vertauschbar. Daraus folgt, die Observable $L_u \otimes I + I \otimes L_u$ hat Eigenwerte ± 1 und 0 (doppelt); und die Observable $L_u \otimes L_u$ hat Eigenwerte $\pm \frac{1}{4}$ (jeweils doppelt). Der maximal verschränkte Operator ist ein gemeinsamer Eigenvektor von all diesen Observablen:

- $(L_u \otimes I + I \otimes L_u)\phi_\times = 0$ (Summe der Drehimpulse ist gleich 0);

- $L_u \otimes L_u \phi_\times = -\frac{1}{4} \phi_\times$ (Produkt der Drehimpule ist gleich $-\frac{1}{4}$).

Die Eigenwerte der beiden Einzelmessungen $L_u \otimes I, I \otimes L_u$ sind $\pm\frac{1}{2}$, und eine gemeinsame Basis von Eigenvektoren ist $e_1 \otimes e_1, e_1 \otimes e_2, e_2 \otimes e_1, e_2 \otimes e_2$. Der Zustand ϕ_\times projiziert auf $e_1 \otimes e_2$ oder $e_2 \otimes e_1$ mit jeweils Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$.

Im Fall von zwei Systemen ist es nun so, dass die beiden Summanden örtlich weit getrennt sein können. Man kann zum Beispiel zwei Elektronen maximal verschränken und dann eines der beiden in einem Paket zum Nordpol schicken. Wenn ich jetzt bei meinem Elektron L_z messe und $\frac{1}{2}$ erhalte, weiss ich, dass mein Kollege am Nordpol für L_z den Wert $-\frac{1}{2}$ erhalten wird.

Die Physiker Einstein, Podolsky und Rosen haben genau dieses Gedankenexperiment verwendet, um zu argumentieren, dass die Quantenmechanik unvollständig ist. Informationsübertragung zwischen den beiden Elektronen ist ja nach dem Transport nicht mehr möglich, weil es am Nordpol kein Internet gibt. Also müssen sich die beiden Elektronen schon vorher ohne unser Wissen abgesprochen haben, welches Ergebnis bei Messung zu zeigen ist, und zwar für alle möglichen Einheitsvektoren. Diese Information steckt also noch in den beiden Teilsystemen drin, ohne dass wir drauf Zugriff haben, und bestimmt das Endergebnis. Es könnte ja zum Beispiel irgendwas mit der Phase der Schwingung zu tun haben, hier mußten wir ja schon zugeben dass wir Lösungen der Schrödinger-Gleichung mit unterschiedlicher Phase nicht unterscheiden können. Es kann aber auch ganz was anderes, noch Unbekanntes sein.

Der Physiker Bell hat (fast 30 Jahre später!) dieses Argument mit einem Gegen-Gedankenexperiment widerlegt. Es seien u, v, w drei Einheitsvektoren, die jeweils einen Winkel von $\frac{2\pi}{3}$ einschließen (sie müssen dann in einer Ebene liegen).

Proposition 7.2. *Die Observable $L_u \otimes L_v$ hat die Eigenwerte $\pm\frac{1}{4}$. Im Zustand ϕ_\times ist die Wahrscheinlichkeit für das Messresultat $+\frac{1}{4}$ gleich das Quadrat des Sinus des halben eingeschlossenen Winkels.*

Beweis. Die Observablen $L_u \otimes I$ und $I \otimes L_v$ haben Eigenwerte $\pm\frac{1}{2}$. Eine gemeinsame Basis von Eigenvektoren ist

$$\phi_{++} = \phi_u \otimes \phi_v, \phi_{+-} = \phi_u \otimes \phi_{-v}, \phi_{-+} = \phi_{-u} \otimes \phi_v, \phi_{--} = \phi_{-u} \otimes \phi_{-v}.$$

Diese vier sind daher auch die Eigenvektoren von $L_u \otimes L_v$.

Wir wählen ein Koordinatensystem in dem $\phi_u = (1, 0)$ und $\phi_v = (c, s)$, wobei c und s der Cosinus und Sinus des halben eingeschlossenen Winkels sind. Dann sind die Eigenvektoren

$$\phi_{++} = (c, s, 0, 0), \phi_{+-} = (-s, c, 0, 0), \phi_{-+} = (0, 0, c, s), \phi_{--} = (0, 0, -s, c),$$

und $\phi_\times = \sqrt{\frac{1}{2}}(s\phi_{++} - c\phi_{+-} - c\phi_{-+} + s\phi_{--})$. Die Eigenvektoren zu $+\frac{1}{4}$ sind ϕ_{++} und ϕ_{--} . Die Länge des projizierten Vektors ist daher gleich $|s|$ es folgt die Behauptung. \square

Das Resultat ist das gleiche, das man erhalten würde, wenn ich an meinem Elektron in Linz in Richtung u den Wert $+\frac{1}{2}$ erhalte und dem Kollegen am Nordpol das Resultat mitteile. Der hätte dann indirekt die Information, dass sein Elektron in Richtung $-u$ den Wert $+\frac{1}{2}$ ergeben würde. Sein elektron ist also im Zustand ϕ_{-u} . Nach Lemma 6.4 ist die Wahrscheinlichkeit, dass er in Richtung v ebenfalls $+\frac{1}{2}$ misst, gleich der Cosinus des halben von $-u$ und v eingeschlossenen Winkels.

Im Fall von Bell sind also die Wahrscheinlichkeiten

$$P_\times \left(L_u \otimes L_v \rightarrow \frac{1}{4} \right) = P_\times \left(L_u \otimes L_w \rightarrow \frac{1}{4} \right) = P_\times \left(L_v \otimes L_w \rightarrow \frac{1}{4} \right) = \sin^2 \left(\frac{2\pi}{3} \right) = \frac{1}{4}.$$

Angenommen, Einstein, Podolsky und Rosen hätten Recht und diese Wahrscheinlichkeiten sind im Vorhinein abgesprochen zwischen den beiden Elektronen. Es sei E_1 das Ereignis "bei Messung von u liefert Linz $+\frac{1}{2}$ und Nordpol $-\frac{1}{2}$ ", und E_2, E_3 analog für u, v . Wir definieren die Abkürzungen $p_{+++} = P(E_1 \wedge E_2 \wedge E_3), \dots, p_{---} = P(\neg E_1 \wedge \neg E_2 \wedge \neg E_3)$. Dann gilt

$$P_\times \left(L_u \otimes L_v \rightarrow \frac{1}{4} \right) = p_{+++} + p_{+-+} + p_{-++} + p_{---},$$

$$P_{\times} \left(L_u \otimes L_w \rightarrow \frac{1}{4} \right) = p_{++++} + p_{+--+} + p_{-+-} + p_{----},$$

$$P_{\times} \left(L_v \otimes L_w \rightarrow \frac{1}{4} \right) = p_{++++} + p_{-+++} + p_{+---} + p_{----}.$$

Korollar 7.3. Die Erklärung von Einstein, Podolsky und Rosen widerspricht elementaren Gesetzen der Wahrscheinlichkeitsrechnung.

Nämlich $\sum_{i,j,k}^{+,-} p_{ijk} = 1$ und $p_{ijk} \geq 0$.

8 Der Harmonische Oszillator

In der Hamilton-Mechanik ist der harmonische Oszillator gegeben durch die Standardform und die Hamilton-Funktion $h(p, q) = \frac{p^2 + q^2}{2}$ gegeben. In der Nähe von Extremstellen lässt sich das dynamische Verhalten im allgemeinen Fall lokal durch einen harmonischen Oszillator approximieren, darum ist dieses System sehr häufig anzutreffen.

Sehen wir und jetzt das quantenmechanische Analog an. Auch in der Quantenmechanik tritt er häufig auf, in Form einer lokalen Näherung wenn die Hamiltonian komplizierter ist, etwa bei Teilchen in einem Kristallgitter.

Die Bestimmung des richtigen Hilbertraums ist kompliziert, als erste Approximation tuts der Raum der Funktionen $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Die Eigenwerte des Operators Q sind alle reellen Zahlen. Für $q \in \mathbb{R}$ soll ϕ_q die Funktion $x \mapsto \delta_q(x)$ sein, wobei $\delta(q) = 1$ und $\delta(1) = 0$ für $x \neq q$ ist: das Teilchen befindet sich am Ort q_0 . Ein Operator, der genau diese Funktionen als Eigenvektoren hat, ist

$$Q : f \mapsto f \cdot \text{id}_{\mathbb{R}},$$

d.h. $Qf(x) = xf(x)$ für alle $f \in \mathcal{H}$ und $x \in \mathbb{R}$.

Der Impulsoperator P wird so gewählt, dass, wenn man ihn als Hamiltonian wählt, die Eigenfunktionen als Funktionen in x, t zum Eigenwert p_0 nur von $x - p_0 t$ abhängt: also eine Welle, die mit Geschwindigkeit p_0 nach links läuft. Die Funktionen $(x, t) \mapsto g(x - p_0 t)$ sind Lösungen der Gleichung für $y : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$:

$$\frac{\partial y}{\partial t} = -p_0 \frac{\partial y}{\partial x} = (-i)(-ip_0) \frac{\partial y}{\partial x},$$

also muss der Impulsoperator gerade $P : f \mapsto -if'$ sein. Der Eigenvektor ψ_{p_0} ist dann die Lösung der Differentialgleichung für f : $f' = -ip_0 f$, also $\psi_{p_0}(x) = e^{-ip_0 x}$.

Die beiden Operatoren erfüllen die Gleichung $[Q, P] = iI$, wobei I der Identitätsoperator ist. Auch in der klassischen Hamilton-Mechanik hatten wir eine ähnliche Gleichung $\{q, p\} = 1$.

Als Hilbertraum \mathcal{H} wählen wir $L^2(\mathbb{R})$, die Menge der Äquivalenzklassen von Funktionen $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, für die das Integral $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx$ existiert; modulo die Funktionen, für die dieses Integral Null ist. Das Skalarprodukt ist $\langle f | g \rangle := \int_{-\infty}^{\infty} \overline{f(x)} g(x) dx$. Jetzt haben wir noch ein paar technische Probleme:

- Weder P noch Q sind auf ganz \mathcal{H} definiert.
- Die Funktionen ϕ_{q_0} sind alle Null im Hilbertraum (das Integral existiert und ist Null).
- Die Funktionen ψ_{p_0} sind nicht im Hilbertraum.

Mein Eindruck ist, dass den meisten Physikern und Physikerinnen diese Kleinigkeiten egal sind, man rechnet drauf los und sieht dann schon ob das Ergebnis physikalisch sinnvoll ist. Wir sind jedoch Mathematiker bzw. Mathematikerinnen und wollen das technische Problem gleich beheben. Dazu definieren wir einen dichten Unterraum $\mathcal{K} \subset \mathcal{H}$, auf dem alle Hintereinanderausführungen von P und Q definiert sind, mit Werten wieder in \mathcal{K} . Das sind alle beliebig oft differenzierbaren Funktionen f , sodass für alle m und n die Funktion $x \mapsto x^m f^{(n)}(x)$ immer noch quadratisch über

\mathbb{R} integrierbar sind. Die Operatoren P, Q sind dann Operatoren von \mathcal{K} nach \mathcal{K} und es gilt für alle $f, g \in \mathcal{K}$:

$$\langle Qf | g \rangle = \langle f | Qg \rangle, \langle Pf | g \rangle = \langle f | Pg \rangle.$$

Die erste Gleichung sieht man schnell, bei der zweiten braucht man partielle Integration. - Die beiden Operatoren sind also selbstadjungiert, das ist ja schon einmal was.

Die Eigenwerte von P und Q suchen wir nun nicht mehr in \mathcal{H} , sondern in \mathcal{K}^* , dem Dualraum von \mathcal{K} . Wenn $u \in \mathcal{K}^*$ und $f \in \mathcal{K}$ ist, so schreiben wir $\langle u | f \rangle$ für die Auswertung des Funktionals u bei f . (Das Funktional wird immer links geschrieben.) Jeder Operator $A : \mathcal{K} \rightarrow \mathcal{K}$ besitzt einen dualen Operator $A^* : \mathcal{K}^* \rightarrow \mathcal{K}^*$, und diese haben Eigenvektoren. Zum Beispiel hat der Operator Q für $q_0 \in \mathbb{R}$ den Eigenvektor $u : \mathcal{K} \rightarrow \mathbb{R}, f \mapsto f(q_0)$, also die Auswertung bei q_0 . In Übereinstimmung mit der Notation oben wollen wir dieses Auswertungsfunktional mit δ_{q_0} bezeichnen. Dann gilt $\langle q | f \rangle = f(q)$.

Wie siehts mit der Zerlegung einer Funktion $f \in \mathcal{K}$ in Eigenvektoren aus? Dazu brauchen wir ein Maß auf der Menge der Eigenwerte; in Fall Q ist das das Integral $\int_{-\infty}^{\infty}$. Es sei $\phi_\lambda \in \mathcal{K}^*$ der Eigenvektor zum Eigenwert λ . Wir verlangen, dass für zwei Funktionen $f, g \in \mathcal{K}$ die Gleichung

$$\langle f | g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\langle \phi_\lambda | f \rangle} \langle \phi_\lambda | g \rangle d\lambda$$

erfüllt ist (sonst ist unser System von Eigenvektoren nicht vollständig oder wir haben ein falsches Maß darauf). Für P und die Eigenvektoren δ_q ist das offensichtlich okay.

Wenden wir uns nun dem Impulsoperator P zu. Hier ist $\langle \psi_p | f \rangle$ gleich dem Wert der Fourier-Transformierten \check{f} bei p , und die verlangte Eigenschaft folgt daraus, dass die Fourier-Transformation das Skalarprodukt erhält: $\langle f | g \rangle = \langle \check{f} | \check{g} \rangle$.

Die Axiome der Quantenmechanik müssen angepaßt werden: das Resultat einer Messung ist nicht mehr eine reelle Zahl, sondern eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf der Menge der reellen Zahlen. Schon vor der Messung bestimmt der Zustand $\phi \in \mathcal{K}$ schon eine Wahrscheinlichkeitsverteilung, die durch die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\lambda \mapsto |\langle \phi_\lambda | \phi \rangle|^2$ gegeben ist. Die a priori Wahrscheinlichkeit für einen Messwert im Intervall $[a, b]$ ist gleich $\int_a^b |\langle \phi_\lambda | \phi \rangle|^2 d\lambda$. Nach der Messung ist man schlauer und hat eine andere Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\pi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Aber nicht jede Dichtefunktion ist möglich: π muss so beschaffen sein, dass es ein $\psi \in \mathcal{K}$ gibt, sodass für alle $\lambda \in \mathbb{R}$ gilt $|\langle \phi_\lambda | \psi \rangle|^2 = \pi(\lambda)$. Schließlich muss es ja auch einen Zustand nach der Messung geben. Im Fall von P und Q kann man zeigen, dass Normalverteilungen möglich sind.

Die Hamiltonian im harmonischen Oszillator ist nicht schwer zu erraten: $H = \frac{P^2 + Q^2}{2}$. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung für $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ist daher

$$\forall x : x^2 \phi(x) - \phi''(x) = 2\lambda \phi(x),$$

wobei $\lambda \in \mathbb{R}$ ein Eigenwert ist. Mit Maple oder Mathematica bekommt man für jedes λ zwei Lösungen, die allerdings spezielle Funktionen mit komplexen Argumenten enthalten und nicht leicht auszuwerten sind. Die meisten davon sind leider nicht in \mathcal{K} , das wären aber die interessantesten.

Für alle $f \in \mathcal{H}$ gilt

$$\langle 2Hf | f \rangle = \langle P^2 f | f \rangle + \langle Q^2 f | f \rangle = \langle Pf | Pf \rangle + \langle Qf | Qf \rangle \geq 0,$$

daher gibt es keine negativen Eigenwerte. Wir definieren die Operatoren

$$A_- := \frac{i}{\sqrt{2}}(P - iQ), \quad A_+ := \frac{i}{\sqrt{2}}(P + iQ), \quad N := A_+ A_-.$$

Dann kann man durch Nachrechnen zeigen:

$$[A_-, A_+] = I, \quad A_- A_+ = N + I, \quad H = N + \frac{1}{2}I.$$

Die Operatoren A_+ und A_- werden *Erhöhungoperator* und *Erniedrigungoperator* genannt. Der Grund ist der folgende.

Proposition 8.1. *Es sei v ein Eigenvektor von N zum Eigenwert $\lambda \in \mathbb{R}$.*

- A_+v ist Eigenvektor of N zum Eigenwert $\lambda + 1$ oder Null.
- A_-v ist Eigenvektor of N zum Eigenwert $\lambda - 1$ oder Null.

Beweis.

$$NA_+v = A_+A_-A_+v = A_+(N + I)v = A_+(\lambda + 1)v = (\lambda + 1)A_+v.$$

$$NA_-v = (A_-A_+ - I)A_-v = (A_-A_+A_- - A_-)v = (A_-N - A_-)v = A_n\lambda v - A_-v = (\lambda - 1)A_-v.$$

□

Nachdem H keine negative Eigenwerte hat, hat N keine Eigenwerte, sind die Eigenwerte von A_- alle nach unten beschränkt. Durch wiederholte Erniedrigung kann man also jeden Eigenvektor auf Null bringen, und im letzten Schritt davor hat man einen Vektor im Kern von A_- . Umgekehrt ist jeder Vektor im Kern von A_- ein Eigenvektor von $N = A_+A_-$ zum Eigenwert 0, und durch wiederholte Anwendung des Erhöhungsoperators kriegen wir alle anderen Eigenvektoren.

Rechnen wir uns den Kern von A_- aus. Dieser besteht aus den Lösungen der Differentialgleichung für f :

$$\forall x : f'(x) + xf(x) = 0$$

und die normierte Lösung ist $\phi_0 : x \mapsto \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-x^2/2}$. Diesen Zustand nennen wir den Grundzustand.

Die Differentialgleichung für den Kern von A_+ hat schon auch eine Lösung, nämlich $x \mapsto e^{-x^2/2}$, aber die liegt nicht in \mathcal{H} . Also sind die Eigenwerte von N genau die natürlichen Zahlen und die Eigenwerte von H sind von der Form $n + \frac{1}{2}$, $n \in \mathbb{N}$.

Die normierten Lösungen bezeichnet man mit ϕ_1, ϕ_2, \dots . Die Differenz zweier benachbarter Eigenwerte von H ist in unserer Rechnung immer 1. Im allgemeinen hat man bei der Gleichung des Oszillators auch noch Konstanten h und ω dabei, und die Differenz ist $h\omega$.

Literatur

L. Susskind and A. Hrabovsky, The Theoretical Minimum. Basic Books, 2013.

L. Susskind, Classical Mechanics: the Theoretical Minimum. <http://theoreticalminimum.com/courses/classical-mechanics/2011/fall>

L. Susskind and A. Friedman, Quantum Mechanics: the Theoretical Minimum. Basic Books, 2014.

L. Susskind, Quantum Mechanics: the Theoretical Minimum. <http://theoreticalminimum.com/courses/quantum-mechanics/2012/winter>