

4.1 ROCKET SCIENCE

a)

$$L = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (4.1)$$

$$p = \frac{\partial L}{\partial v} = mv \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (4.2)$$

b)

$$H = pv - L \quad (4.3)$$

$$= mv^2 \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} + mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (4.4)$$

$$= \frac{mv^2 + mc^2 - mc^2 v^2/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (4.5)$$

$$= \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (4.6)$$

Nun ist es einfacher rückwärts vom gegebenen H zu starten:

$$H = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (4.7)$$

$$= \frac{\sqrt{m^2 v^2 \cdot c^2 + m^2 c^4 \cdot (1 - v^2/c^2)}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (4.8)$$

$$= \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (4.9)$$

Die Taylorentwicklung von H für große c (oder kleine  $1/c$ ) lautet

$$H = mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} + \dots, \quad (4.10)$$

und der letzte Term ist die gesuchte relativistische Energiekorrektur.

- c) Wir empfehlen immer, solche Beispiele auf die fundamentale Poissonklammer  $\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$  zurückzuführen. Die weiteren Glieder der Taylorentwicklung bestehen auch aus geraden Potenzen von p. Um zu zeigen dass die Poisson Klammer von  $L_z$  und H verschwindet, genügt es also zu zeigen dass

$$\{p^2, L_z\} = 0, \quad (4.11)$$

da zB.  $\{p^4, L_z\} = 2p^2\{p^2, L_z\}$ . Das ist (mit dem komplett antisymmetrischem Levi-Civita Symbol  $\epsilon_{ijk}$ )

$$\{p_i p_i, \epsilon_{zjk} q_j p_k\} = 2p_i \epsilon_{zjk} p_k \{p_i, q_j\} \quad (4.12)$$

$$= 2\epsilon_{zjk} p_i p_k (-\delta_{ij}) \quad (4.13)$$

$$= -2\epsilon_{zjk} p_j p_k = 0, \quad (4.14)$$

Null, da  $\epsilon_{zjk}$  antisymmetrisch in  $(j, k)$ , aber  $p_j p_k$  symmetrisch in  $(j, k)$  ist. (Explizite Lösungen ohne Indexnotation sind natürlich auch korrekt.)

#### 4.2 3-ATOMIGES MOLEKÜL

- a) Die Einschränkung auf eine Dimension kann als holonom-skleronome Zwangsbedingung aufgefasst werden. Weiters ist das System konservativ. Damit lassen sich Lagrangefunktion und Hamiltonfunktion direkt angeben (alternativ lässt sich hier wieder eine Legendretransformation "üben"):

$$T = \frac{1}{2} m_1 (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_3^2) + \frac{1}{2} m_2 \dot{x}_2^2 \quad (4.15)$$

$$V = \frac{1}{2} k \left( (x_1 - x_2)^2 + (x_3 - x_2)^2 \right) \quad (4.16)$$

$$L = T - V = \frac{1}{2} m_1 (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_3^2) + \frac{1}{2} m_2 \dot{x}_2^2 - \frac{1}{2} k \left( (x_1 - x_2)^2 + (x_3 - x_2)^2 \right) \quad (4.17)$$

Mit den generalisierten Impulsen lässt sich eine Legendretransformation ausführen:

$$p_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_1} = m_1 \dot{x}_1 \quad (4.18)$$

$$p_2 = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_2} = m_2 \dot{x}_2 \quad (4.19)$$

$$p_3 = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_3} = m_1 \dot{x}_3 \quad (4.20)$$

$$(4.21)$$

$$H = \sum_{j=1}^3 p_j \dot{x}_j - L = T + V = \frac{p_1^2 + p_3^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{1}{2} k \left( (x_1 - x_2)^2 + (x_3 - x_2)^2 \right) \quad (4.22)$$

- b) Wir bestimmen die Bewegungsgleichungen des Systems:

$$\dot{x}_1 = \frac{\partial H}{\partial p_1} = \frac{p_1}{m_1} \quad (4.23)$$

$$\dot{p}_1 = -\frac{\partial H}{\partial x_1} = -k(x_1 - x_2) \quad (4.24)$$

$$\dot{x}_2 = \frac{\partial H}{\partial p_2} = \frac{p_2}{m_2} \quad (4.25)$$

$$\dot{p}_2 = -\frac{\partial H}{\partial x_2} = k(x_1 - x_2) + k(x_3 - x_2) \quad (4.26)$$

$$\dot{x}_3 = \frac{\partial H}{\partial p_3} = \frac{p_3}{m_1} \quad (4.27)$$

$$\dot{p}_3 = -\frac{\partial H}{\partial x_3} = -k(x_3 - x_2) \quad (4.28)$$

$$(4.29)$$

Wir ersetzen hier die kanonischen Impulse um statt 6 DGL 1.Ordnung, 3 DGL 2.Ordnung zu erhalten. Daraus lässt sich mit dem Ansatz

$$x_i(t) = c_i e^{i\omega t} \quad (4.30)$$

folgendes Gleichungssystem anschreiben:

$$\begin{bmatrix} -\omega^2 + \frac{k}{m_1} & -\frac{k}{m_1} & 0 \\ -\frac{k}{m_2} & -\omega^2 + 2\frac{k}{m_2} & -\frac{k}{m_2} \\ 0 & -\frac{k}{m_1} & -\omega^2 + \frac{k}{m_1} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = 0 \quad (4.31)$$

Nicht-triviale Lösungen erfordern das Verschwinden der Säkulardeterminante:

$$\left(-\omega^2 + \frac{k}{m_1}\right)^2 \left(-\omega^2 + 2\frac{k}{m_2}\right) - \frac{2k^2}{m_1 m_2} \left(-\omega^2 + \frac{k}{m_1}\right) \stackrel{!}{=} 0 \quad (4.32)$$

Wir lesen die erste Eigenfrequenz einfach ab:

$$\omega_1 = \pm \sqrt{\frac{k}{m_1}} \quad (4.33)$$

und bestimmen die anderen beiden aus:

$$\left(-\omega^2 + \frac{k}{m_1}\right) \left(-\omega^2 + 2\frac{k}{m_2}\right) - \frac{2k^2}{m_1 m_2} \stackrel{!}{=} 0 \quad (4.34)$$

$$\omega^4 - \omega^2 \left(\frac{k}{m_1} + 2\frac{k}{m_2}\right) = 0 \quad (4.35)$$

$$\rightarrow \omega_2 = 0 \quad (4.36)$$

$$\rightarrow \omega_3 = \pm \sqrt{k \left(\frac{1}{m_1} + \frac{2}{m_2}\right)} \quad (4.37)$$

Zur Interpretation der Fundamentalmoden setzen wir die erhaltenen Frequenzen ein und bestimmen die Koeffizienten  $c_i$ :

I. )  $\omega = \omega_1$

$$c_1 = -c_3 \text{ und } c_2 = 0 \quad (4.38)$$

Äußere Atome schwingen gegenphasig mit gleicher Amplitude um das ruhende mittlere Atom.

II. )  $\omega = \omega_2$

$$c_1 = c_2 = c_3 \quad (4.39)$$

Ruhende Atome / Translation aller Atome (ohne Relativbewegung).

III. )  $\omega = \omega_3$

$$c_1 = -\frac{m_2}{2m_1} c_2 \text{ und } c_1 = c_3 \quad (4.40)$$

Hier schwingen die Äußeren Atome gleichphasig mit der selben Amplitude während das mittlere Atom relativ dazu gegenphasig mit eben jener Amplitude schwingt die dafür sorgt dass der Schwerpunkt unbewegt bleibt.

### 4.3 PHASENRAUMPORTRAIT DES TEILCHENS AUF EINER HÜGEL-LANDSCHAFT

a)

$$y = \cos(ax) \rightarrow \dot{y} = -\sin(ax)a\dot{x} \quad (4.41)$$

$$L = T - V \quad (4.42)$$

$$= \frac{m\dot{x}^2}{2} (1 + a^2 \sin^2(ax)) - mg \cos(ax) \quad (4.43)$$

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} (1 + a^2 \sin^2(ax)) \quad (4.44)$$

$$\rightarrow \dot{x} = \frac{p}{m} \frac{1}{1 + a^2 \sin^2(ax)} \quad (4.45)$$

$$H = p\dot{x} - L \quad (4.46)$$

$$= \frac{p^2}{2m} \frac{1}{1 + a^2 \sin^2(ax)} + mg \cos(ax) \quad (4.47)$$

b)

$$H = \frac{p^2}{2} \frac{1}{1 + \sin^2(x)} + \cos(x) \quad (4.48)$$

Die Entwicklungen des Hamiltonians um  $x_0 + x$  sind

$$x_0 = 0: \quad H \approx \frac{p^2}{2} + 1 - \frac{x^2}{2} \quad (4.49)$$

$$x_0 = \pi: \quad H \approx \frac{p^2}{2} - 1 + \frac{x^2}{2} \quad (4.50)$$

$$x_0 = \frac{\pi}{2}: \quad H \approx \frac{p^2}{4} - x \quad (4.51)$$

$$x_0 = -\frac{\pi}{2}: \quad H \approx \frac{p^2}{4} + x. \quad (4.52)$$

Damit lauten die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen  $\dot{p} = -\partial H/\partial x$  und  $\dot{x} = \partial H/\partial p$

$$x_0 = 0: \quad \dot{p} = x, \quad \dot{x} = p \quad (4.53)$$

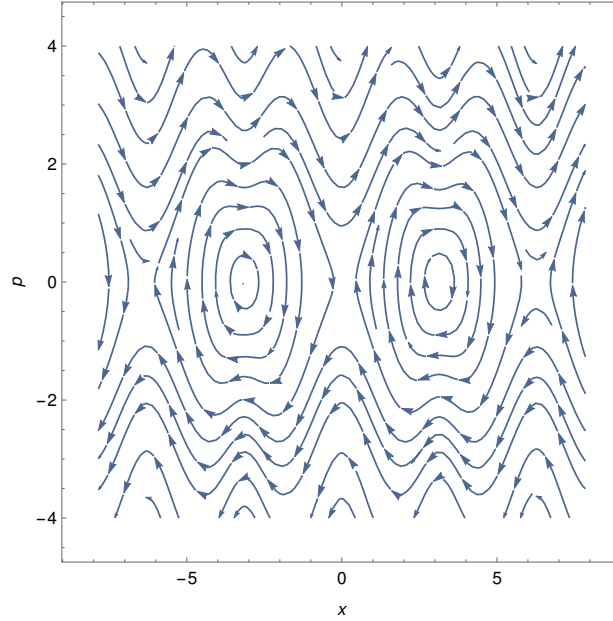
$$x_0 = \pi: \quad \dot{p} = -x, \quad \dot{x} = p \quad (4.54)$$

$$x_0 = \frac{\pi}{2}: \quad \dot{p} = 1, \quad \dot{x} = \frac{p}{2} \quad (4.55)$$

$$x_0 = -\frac{\pi}{2}: \quad \dot{p} = -1, \quad \dot{x} = \frac{p}{2}. \quad (4.56)$$

Für große  $p$  ist der Term  $\frac{p^2}{2m} \frac{1}{1 + a^2 \sin^2(ax)}$  viel wichtiger als  $mg \cos(ax)$ . Wir erhalten daher "fast" ein freies Teilchen – ein Teilchen dass einfach über die Hügelandschaft hinwegläuft. Alle  $\dot{x} \propto p$ , und sind damit riesig groß, während alle  $\dot{p}$  von der Größenordnung 1 sind.

c) Damit können wir nun folgendes Diagramm zeichnen:



Wichtig ist der *Fixpunkt* an  $x = \pi$  (die Ellipse – der Massepunkt rollt unten hin und her), die *Separatrizen* – welche Phasenraumgebiete mit unterschiedlichem Verhalten voneinander trennt, an  $x = \pi$  (das Kreuz – die Kugel rollt von oben in eine Richtung), und die fast geraden Linien für große  $p$  – das Teilchen läuft über die Hügellandschaft hinweg. (Beachte: Trajektorien für große  $p$  sehen ein bisschen komisch, geschwungen aus, denn  $p$  ist nicht der mechanische Impuls  $mv$  sonder der kanonische!)

#### 4.4 SPASS MIT POISSON KLAMMERN

- a) Beweise der Jacobi Identität gehen auch eleganter, aber wir rechnen explizit, mit folgender Kurznotation:

$$\xi_a = \frac{\partial \xi}{\partial a} \quad (4.57)$$

$$\xi_{ab} = \frac{\partial \xi}{\partial a \partial b} \quad (4.58)$$

Ohne Einschränkung der Allgemeinheit beschränken wir uns auf eine Dimension  $(q, p)$ .

$$\{A, B\} = A_q B_p - A_p B_q \quad (4.59)$$

$$\{A, \{B, C\}\} = A_q (B_q C_p - B_p C_q)_p - A_p (B_q C_p - B_p C_q)_q \quad (4.60)$$

Damit berechnen wir:

$$\{A, \{B, C\}\} = A_q (B_{qp} C_p + B_q C_{pp} - B_{pp} C_q - B_p C_{qp}) - A_p (B_{qq} C_p + B_q C_{qp} - B_{qp} C_q - B_p C_{qq}) \quad (4.61)$$

$$\{B, \{C, A\}\} = B_q (C_{qp} A_p + C_q A_{pp} - C_{pp} A_q - C_p A_{qp}) - B_p (C_{qq} A_p + C_q A_{qp} - C_{qp} A_q - C_p A_{qq}) \quad (4.62)$$

$$\{C, \{A, B\}\} = C_q (A_{qp} B_p + A_q B_{pp} - A_{pp} B_q - A_p B_{qp}) - C_p (A_{qq} B_p + A_q B_{qp} - A_{qp} B_q - A_p B_{qq}) \quad (4.63)$$

Aufsummieren der obigen Ausdrücke ergibt die gesuchte Identität:

$$\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0 \quad (4.64)$$

b)

$$\{L_x, y\} = \{\epsilon_{xjk} r_j p_k, r_y\} \quad (4.65)$$

$$= \epsilon_{xjk} r_j (-\delta_{ky}) \quad (4.66)$$

$$= -\epsilon_{xjy} r_j \quad (4.67)$$

$$= \epsilon_{xyj} r_j = z \quad (4.68)$$

$$\{L_y, p_z\} = \{\epsilon_{yjk} r_j p_k, p_z\} \quad (4.69)$$

$$= \epsilon_{yjk} p_k \delta_{jz} \quad (4.70)$$

$$= \epsilon_{yzk} p_k = p_x \quad (4.71)$$

c)

$$\{L_z, L_x\} = \{\epsilon_{zij} r_i p_j, \epsilon_{xkl} r_k p_l\} \quad (4.72)$$

$$= \epsilon_{zij} p_j \epsilon_{xkl} r_k \delta_{il} - \epsilon_{zij} r_i \epsilon_{xkl} p_l \delta_{jk} \quad (4.73)$$

$$= -\epsilon_{zjl} p_j \epsilon_{xkl} r_k + \epsilon_{zik} \epsilon_{xkl} r_i p_l \quad (4.74)$$

$$= -(\delta_{zx} \delta_{jk} - \delta_{zk} \delta_{jx}) r_k p_j + (\delta_{zx} \delta_{il} - \delta_{zl} \delta_{ix}) r_i p_l \quad (4.75)$$

$$= r_z p_x - r_x p_z = \epsilon_{yij} r_i p_j = L_y \quad (4.76)$$

Analog lässt sich generell zeigen:

$$\{L_i, L_j\} = \epsilon_{ijk} L_k \quad (4.77)$$

Wir nehmen an, dass  $L_x$  und  $L_y$  erhalten sind:

$$\{L_x, H\} = \{L_y, H\} = 0 \quad (4.78)$$

und benutzen die Jacobi-Identität:

$$0 = \{L_x, \{L_y, H\}\} + \{H, \{L_x, L_y\}\} + \{L_y, \{H, L_x\}\} \quad (4.79)$$

$$= 0 + \{H, \{L_x, L_y\}\} + 0 \quad (4.80)$$

$$= \{H, L_z\} \quad (4.81)$$

d) Die Hamiltonfunktion des Systems lässt sich in Kugelkoordinaten wie folgt anschreiben:

$$H(r, p_r, \theta, p_\theta, \phi, p_\phi) = \frac{1}{2m} \left( p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\phi^2}{r^2 \sin^2(\theta)} \right) - \alpha q^2 \frac{e^{-\beta m r}}{r} \quad (4.82)$$

Die z-Komponente des Drehimpulses in Kugelkoordinaten ergibt sich zu:

$$L_z = x p_y - y p_x = m(x \dot{y} - y \dot{x}) = \dots = m r^2 \sin^2(\theta) \dot{\phi} = p_\phi \quad (4.83)$$

In den gewählten Koordinaten ist besonders leicht zu erkennen dass die Poissonklammer mit der Hamiltonfunktion verschwindet:

$$\{L_z, H\} = \left\{ p_\phi, \frac{1}{2m} \left( p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\phi^2}{r^2 \sin^2(\theta)} \right) - \alpha q^2 \frac{e^{-\beta m r}}{r} \right\} = 0 \quad (4.84)$$

Das Betragsquadrat des Drehimpulses  $L^2$  lässt sich in Kugelkoordinaten als  $p_\theta^2 + p_\phi^2 / \sin^2(\theta)$  schreiben.

$$\{L^2, H\} = \left\{ p_\theta^2 + \frac{p_\phi^2}{\sin^2(\theta)}, \frac{1}{2m} \left( p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\phi^2}{r^2 \sin^2(\theta)} \right) - \alpha q^2 \frac{e^{-\beta m r}}{r} \right\} \quad (4.85)$$

$$= \frac{1}{2mr^2} \underbrace{\left\{ p_\theta^2 + \frac{p_\phi^2}{\sin^2(\theta)}, p_\theta^2 + \frac{p_\phi^2}{\sin^2(\theta)} \right\}}_{=0} = 0 \quad (4.86)$$