Miksi Poissonin sulut?

Sanotaan, että meillä on muunnos $(q,p) \longrightarrow (Q,P)$
Alussa tiedämme, että meillä on Hamiltonin liikeyhtälöt

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad \text{ja} \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

Haluamme, että tämä muoto on voimassa myös uusissa koordinaateissa. Katsotaan milloin näin on. Alussa $H(q,p) \to K(Q,P)$

Ensin aikaderivaatta Q:sta

$$\frac{d}{dt} Q(q,p) = \frac{\partial Q}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial Q}{\partial p}\dot{p} = \frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q}$$

Toisaalta uusi Hamiltonin funktio $K(Q,P)$ on sama kuin $H(q,p)$. Se vain kirjoitetaan eri muuttujissa.

$$\Rightarrow \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{\partial K}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial p} + \frac{\partial K}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial p} \quad \text{ja} \quad \frac{\partial H}{\partial q} = \frac{\partial K}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial q} + \frac{\partial K}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial q}$$

Sijoitetaan aiempaan ja saamme

$$\dot{Q}(q,p) = \frac{\partial Q}{\partial q}\left(\frac{\partial K}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial p} + \frac{\partial K}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial p}\right) - \frac{\partial Q}{\partial p}\left(\frac{\partial K}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial q} + \frac{\partial K}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial q}\right)$$

$$= \frac{\partial K}{\partial P}\underbrace{\left(\frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p} - \frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial P}{\partial q}\right)}_{\{Q,P\}} + \frac{\partial K}{\partial Q}\underbrace{\left(\frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial Q}{\partial p} - \frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial Q}{\partial q}\right)}_{0}$$

Toisin sanoen $\dot{Q} = \frac{\partial K}{\partial P}$ jos $\{Q,P\} = 1$ kuten se oli alkuperäisille koordinaateille

Poissonin sulut ja kvanttimekaniikka?

Canonical transformation: $(q,p) \longrightarrow (Q,P)$

Before transformation $H(q,p) \Rightarrow \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}$ & $\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$

After canonical transformation $H(q,p) \rightarrow H'(Q,P)$

and $\dot{Q} = \frac{\partial H'}{\partial P}$ & $\dot{P} = -\frac{\partial H'}{\partial Q}$ i.e. equations have

the same form.

Poisson bracket: $f(q,p)$, $g(q,p)$ for simplicity just 1 coordinate

Poisson bracket: $\{f,g\} = \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial g}{\partial q}$

For a function $f(q,p,t)$ Hamilton's equations imply

$$\frac{d}{dt} f(q,p,t) = \{f,H\} + \frac{\partial f}{\partial t}$$

also $\{q,p\} = 1$ or for more coordinates $\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$

$\{q_i, q_j\} = 0$

$\{p_i, p_j\} = 0$

$\Rightarrow$ Spooky. Looks a lot like quantum mechanics!

$[x,p] = i\hbar$ or Heisenberg eq.: $\frac{d\hat{f}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{f},\hat{H}] + \frac{\partial \hat{f}}{\partial t}$

Jacobi identity: $\{f,\{g,h\}\} + \{g,\{h,f\}\} + \{h,\{f,g\}\} = 0$

in QM: $[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]] + [C,[A,B]] + [B,[C,A]] = 0$

(These ideas helped to unify Schrödingers picture with Heisenbergs)

Kuvitellaan, että olemme keksineet koordinaatit q_i, jotka ovat kaikki syklisiä.

Tällöin niitä vastaavat kanoniset liikemäärät ovat vakioita eli $\dot{p}_i = 0$

$$\Rightarrow p_i = \alpha_i \quad \text{(vakioita)}$$

Jos H on säilyvä suure $H(\alpha_1, \alpha_2 \ldots \alpha_n) = \text{vakio}$

Hamiltonin yhtälöistä on tällöin enää jäljellä

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{\partial H}{\partial \alpha_i} = \omega_i(\alpha)$$

vakio

Tämä on helppo ratkaista $q_i(t) = \omega_i(\alpha) t + \delta_i$

Kaikki koordinaatit riippuvat nyt lineaarisesti ajasta. Haluaisimme löytää muunnoksia, jotka tekevät mahdollisen monen koordinaatin sykliseksi.

Millaiset muunnokset ovat sallittuja?

Euler-Lagrange yhtälöt ovat muuttumattomia jos

a) teemme pistemuunnoksen $Q = Q(q, t)$ niin, että $L(q, t) = L'(Q, t)$

b) Lagrangen funktioon lisätään kokonaisaikaderivaatta $L' = L + \frac{d}{dt} F(q, t)$

H:lle harkitsemme pistemuunnoksia faasiava-ruudessa ts.

$$Q_i = Q_i(p,q,t) \quad \text{ja} \quad P_i = P_i(p,q,t)$$

(q,p):lle pätee $\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$ ja $\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$

Kaikki muunnokset eivät säilytä Hamiltonin yhtälöiden muotoa. Mutta jos on uusi Hamiltonin funktio

$K(Q,P,t)$ niin, että

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} \quad \text{ja} \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i}$$

On muunnos KANONINEN

Hamiltonin periaate: $\delta \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_i p_i \dot{q}_i - H(q,p,t) \right) dt = 0$

tai uuden Hamiltonin avulla

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_i P_i \dot{Q}_i - K(Q,P,t) \right) dt = 0$$

Jotta jälkimmäinen seuraa ensimmäisestä

$$\left(\sum_i p_i \dot{q}_i - H \right) = \sum_i P_i \dot{Q}_i - K + \dot{F}$$

(vakio tekijä voisi olla edessä, mutta kanoniselle muunnokselle se on 1)

F on kanonisen muunnoksen generoiva funktio ja voi riippua vanhoista ja uusista faasiavaruuden koordinaateista.

(1.) $F = F_1(q, Q, t)$ niin että vanhat ja uudet koordinaatit ovat riippumattomia.

$$\Rightarrow \sum_i p_i \dot{q}_i - H = \sum_i P_i \dot{Q}_i - K + \dot{F}_1$$

$$= \sum_i P_i \dot{Q}_i - K + \frac{\partial F_1}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial F_1}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \dot{Q}_i \right)$$

Katsotaan kertoimia

$$\Rightarrow \boxed{p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i}, \quad P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \quad \text{ja} \quad K = H + \frac{\partial F_1}{\partial t}}$$

ja saamme muunnoksen $p_i(q, Q, t)$, $P_i(q, Q, t)$ ja yhteyden H:in ja K:in välille.

Esim. $F_1 = -Q/q$

$$\Rightarrow p = \frac{\partial F_1}{\partial q} = Q/q^2, \quad P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} = 1/q$$

eli $Q = pq^2$ $\quad P = 1/q$ kertoo uudet koordinaatit vanhojen avulla.

(2.) Oletetaan nyt $F = F_2(q_i, P_i, t) - \sum Q_i P_i$

vanhat koordinaatit ja uudet liikemäärät P_i riippumattomia.

$$\Rightarrow \sum_i \dot{q}_i p_i - H = \sum_i \dot{Q}_i P_i - K + \dot{F}_2 - \sum_i \left(\dot{Q}_i P_i + Q_i \dot{P}_i \right)$$

$$= \sum_i -Q_i \dot{P}_i - K + \frac{\partial F_2}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial F_2}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \dot{P}_i \right)$$

ts. $\boxed{p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}, \quad Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i}, \quad K = H + \frac{\partial F_2}{\partial t}}$

Samaan tapaan voisimme valita

$F = F_3(p, Q, t) + \sum_i q_i p_i$ tai

$F = F_4(p, P, t) + \sum_i (q_i p_i - Q_i P_i)$

Kurkkaa vaikka wikipediasta, mutta idea on sama

Harmonic oscillator: Try a transformation

$$p = C\sqrt{2mP}\cos Q \qquad C = \text{constant}$$
$$q = \frac{C}{m\omega}\sqrt{2mP}\sin Q$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 = \frac{1}{\cancel{2m}}C^2\cancel{2m}P\cos^2 Q$$
$$+\frac{1}{\cancel{2}}\cancel{m\omega^2}\frac{C^2}{\cancel{m^2\omega^2}}\cancel{2}mP\sin^2 Q$$

$$= C^2P(\sin^2 Q + \cos^2 Q) = C^2 P = K$$

uusi liikemäärä $P = E/C^2$ ja Q syklinen

Onko muunnos kanoninen? etsitään generoiva muunnos $F = F_1(q,Q)$

$$\frac{p}{q} = m\omega \cot Q$$

Toisaalta $p = \frac{\partial F_1}{\partial q} \Rightarrow F_1 = \int p(q,Q)\,dq + g(Q)$

$$= \frac{1}{2}m\omega q^2 \cot Q + g(Q)$$

$$P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} = \frac{m\omega q^2}{2\sin^2 Q} - \frac{dg}{dQ}$$

Jos valitsemme $dg/dQ = 0 \Rightarrow q^2 = \frac{2P}{m\omega}\sin^2 Q$

muunnos on siis kanoninen jos $C = \sqrt{\omega}$

$\Rightarrow P = E/\omega$

Harmonic oscillator continues ...

The only Hamiltons equation to solve is now

$$\dot{Q} = \frac{\partial K}{\partial P} = \omega \Rightarrow Q(t) = \omega t + \delta$$

$$\Rightarrow q = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \sin(\omega t + \delta)$$

$$p = \sqrt{2mE} \cos(\omega t + \delta)$$

and $q = \sqrt{\frac{2P}{m\omega}} \sin Q \qquad p = \sqrt{2mP\omega} \cos Q$

Kanonisuuden tarkistus edellytti generoivan funktion löytämistä ja jouduimme integroimaan. Derivointi olisi helpompaa ...

Osoitetaan, että muunnos on kanoninen jos se säilyttää Poissonin sulut

Poissonin sulut: $\{f, g\} = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \right)$

Koordinaateille saadaan $\{q_i, q_j\} = 0$, $\{p_i, p_j\} = 0$, $\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$

Muunnos on kanoninen, jos $\{Q_i, P_j\} = \delta_{ij}$, $\{Q_i, Q_j\} = 0$, $\{P_i, P_j\} = 0$

Sanotaan, että meillä on 2-tyypin generoiva funktio $F_2(q,P,t)$. Tällöin

$$p = \frac{\partial F}{\partial q}, \quad Q = \frac{\partial F_2}{\partial P} \text{ ja } K(Q,P,t) = H(q,p,t) + \frac{\partial F_2}{\partial t}$$

Hamiltonin yhtälöt uusissa koordinaatoissa siis edelleen

$$\dot{P} = -\frac{\partial K}{\partial Q} \text{ ja } \dot{Q} = \frac{\partial K}{\partial P}$$

Eikö olisikin ihanaa, jos $K=0$? Jos se olisi nolla, niin myös $\dot{P}=0$ ja $\dot{Q}=0$. Kaikki yleistetyt koordinaatit ja liikemäärät olisivat vakioita. ♥

Valitaan nyt niin, että "Hamilton's pricipal func." S on meidän kanonisen muunnoksen generoiva funktio eli $F_2(q,\alpha,t) = S(q,t) + A$

α = vakio liikemäärä

vakio

$$\Rightarrow p = \frac{\partial F_2}{\partial q} = \frac{\partial S}{\partial q}$$

Toisaalta $H(q,p,t) + \frac{\partial F_2}{\partial t} = 0 \Rightarrow \boxed{H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0}$ Hamilton-Jacobi yhtälö

Lisäksi $Q = \frac{\partial S}{\partial \alpha}$

Meillä on nyt siis osittaisdifferentiaaliyhtälö kanonisen muunnoksen generaattorille, jonka pitäisi antaa erityisen helpot liikeyhtälöt.

Osoittautuu, että "Hamilton's principal function" S liittyy läheisesti vaikutusintegraaliin. $S(q,P,t)$

$$\frac{dS}{dt} = \sum_i \underbrace{\frac{\partial S}{\partial q_i}}_{p_i} \dot{q}_i + \frac{\partial S}{\partial P_i} \underbrace{\dot{P}_i}_{0} + \underbrace{\frac{\partial S}{\partial t}}_{-H} = \sum_i p_i \dot{q}_i - H = L$$

$\Rightarrow S = \int L\,dt$ eli vaikutus + joku vakio

Jos H ei riipu ajasta, $\frac{\partial S}{\partial t} = \text{vakio} = -E \Rightarrow S = W(q) - Et$

yleensä näin

Tällöin Hamilton-Jacobi yhtälö on

$$H\left(q, \frac{\partial W}{\partial q}\right) = E$$

Esimerkki 1: vapaa hiukkanen 1D

$$H(q,p) = p^2/2m \quad \text{eli HJ-yhtälö} \quad \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W(x)}{\partial x}\right)^2 = E$$

Jotta saadaan vakio oikealle, on W:n oltava lineaarinen

$W(x) = \pm x\sqrt{2mE}$ on ratkaisu. $(q = x)$

$$S(q,t) = \pm x\sqrt{2mE} - Et, \quad p = \frac{\partial S}{\partial x} = \pm\sqrt{2mE} \Leftrightarrow E = p^2/2m$$

$$S = \pm xp - p^2/2m\, t \Rightarrow Q = \frac{\partial S}{\partial p} = \pm x - \frac{p}{m}t \quad \text{mikä on vakio}$$

$\Rightarrow x = Q + \frac{p}{m}t$ eli lineaarinen liike.

Esimerkki 2: Lineaarinen Potentiaali $H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + mgz$

$$\Rightarrow \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W}{\partial z}\right)^2 + mgz = +E$$

$$\Rightarrow W(z) = \pm\frac{2\sqrt{2}}{3g\sqrt{m}}(E - mgz)^{3/2}, \quad \text{tarkista} \quad \frac{\partial W}{\partial z} = \pm\frac{2\sqrt{2}}{3g\sqrt{m}}\frac{3}{2}\sqrt{E - mgz}\,(-mg)$$

Sijoitus: $\frac{1}{2m}\cdot 2m(E - mgz) + mgz = E \Leftrightarrow 0 = 0$ OK!

$$\beta = \frac{\partial S}{\partial E} = \pm\sqrt{\frac{2(E - mgz)}{mg^2}} - t \Leftrightarrow z = \frac{E}{mg} - \frac{g}{2}(\beta + t)^2$$

Esimerkki 3: $H = p^2/2m + U(x)$, $S = W(x) - Et$

$$\Rightarrow \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 = E - U(x) \Rightarrow W(x) = \int\sqrt{2m(E - U(x))}\,dx, \quad E = \Pi^2/2m \text{ valinta}$$

$$\Rightarrow S(x,\Pi,t) = \int\sqrt{\Pi^2 - 2mU(x)}\,dx - \frac{\Pi^2}{2m}t - \overset{\text{vakio}}{C}$$

$$p = \frac{\partial S}{\partial x} = \sqrt{\Pi^2 - 2mU(x)}, \quad q = \frac{\partial S}{\partial \Pi} = \int\frac{\Pi\,dx}{\sqrt{\Pi^2 - 2mU(x)}} - \frac{\Pi}{m}t$$

$E = \frac{p^2}{2m} + U$ (energian säilyminen)

$$\Rightarrow t - t_0 = \int dt = \int_{x_0}^{x} \frac{m\,dx}{\sqrt{2m(E-U)}}$$

Esimerkki: generoivaksi funktioksi voi valita melkein mitä vain…saat silti kanonisen muunnoksen

Generoiva funktio $F_1(q,Q,t) = a q^2 Q^3 t$

$$p = \frac{\partial F_1}{\partial q} = 2aqQ^3 t, \quad P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} = -3aq^2Q^2 t, \quad \frac{\partial F_1}{\partial t} = aq^2Q^3$$

$$Q = \left(\frac{p}{2aqt}\right)^{1/3} \longrightarrow P = -3aq^2 t\left(\frac{p}{2aqt}\right)^{2/3} = -(at)^{1/3}\frac{3}{2^{2/3}}q^{4/3}p^{2/3}$$

$$\frac{\partial Q}{\partial q} = \left(\frac{p}{2at}\right)^{1/3}\left(-\frac{1}{3}\right)q^{-4/3}, \quad \frac{\partial Q}{\partial p} = \left(\frac{1}{2aqt}\right)^{1/3}\frac{1}{3}p^{-2/3}$$

$$\frac{\partial P}{\partial q} = -(at)^{1/3}\frac{4}{2^{2/3}}q^{1/3}p^{2/3}, \quad \frac{\partial P}{\partial p} = -(at)^{1/3}q^{4/3}2^{1/3}p^{-1/3}$$

$$\{Q,P\}_{q,p} = \frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p} - \frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial P}{\partial q} = +\frac{1}{3}\cancel{\left(\frac{1}{2at}\right)^{1/3}}\cancel{q^{-4/3}}\cancel{(2at)^{1/3}}\cancel{q^{4/3}}\cancel{p^{-1/3}}\cancel{p^{1/3}}$$

$$+\frac{1}{3}\left(\frac{1}{2at}\right)^{1/3}\cancel{q^{-1/3}}\cancel{p^{-2/3}}(at)^{1/3}2^{4/3}\cancel{q^{1/3}}\cancel{p^{2/3}}$$

$$= +\frac{1}{3} + \frac{1}{3}\cdot 2 = 1$$ $\Rightarrow$ Generoimme kanonisen muunnoksen!

$$\{q,p\}_{q,p} = \frac{\partial q}{\partial q}\frac{\partial p}{\partial p} - \frac{\partial q}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial q} = 1$$

Aiemmin oli harmoninen värähtelijä esimerkki. Lähtökohta oli

$$p = \alpha\sqrt{2mP}\cos Q$$
$$q = \frac{\alpha}{m\omega}\sqrt{2mP}\sin Q$$

tätä ei tuotettu generoivalla funktiolla.

$$\Rightarrow \{q,p\}_{Q,P} = \frac{\partial q}{\partial Q}\frac{\partial p}{\partial P} - \frac{\partial q}{\partial P}\frac{\partial p}{\partial Q} = \frac{\alpha}{m\omega}\sqrt{2mP}\cos Q\cdot\frac{1}{2}\alpha\sqrt{2m}\,P^{-1/2}\cos Q$$
$$-\frac{\alpha}{m\omega}\sqrt{2m}\,\frac{1}{2}P^{-1/2}\sin Q\,(-1)\,\alpha\sqrt{2mP}\sin Q$$
$$= \alpha^2/\omega = 1$$ jos $\alpha = \sqrt{\omega}$!!

Luoko mikä tahansa $F_1(q,Q,t)$ kanonisen muunnoksen?

Tarkistetaan Poissonin sulkeet: $p = \frac{\partial F_1}{\partial q}$, $P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} = P(q,Q,t)$

$$\Rightarrow \{Q,P\}_{q,p} = \frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p} - \frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial P}{\partial q} = \frac{\partial Q}{\partial q}\left(-\frac{\partial^2 F_1}{\partial p \partial Q}\right) + \frac{\partial Q}{\partial p}\left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial q \partial Q}\right)$$

Toisaalta $p = \frac{\partial F_1}{\partial q} = p(q,Q,t) \Rightarrow \frac{\partial^2 F_1}{\partial q \partial Q} = \frac{\partial p}{\partial Q}$, jos derivaatan järjestystä saa vaihtaa

$$\text{eli } \{Q,P\}_{q,p} = \frac{\partial Q}{\partial q}\underbrace{\left(-\frac{\partial^2 F_1}{\partial p \partial Q}\right)}_{0\text{, koska } P(q,Q,t)} + \overbrace{\frac{\partial Q}{\partial p}\left(\frac{\partial p}{\partial Q}\right)}^{1} = 1$$

Toisin sanoen voitte keksiä (melkein) mitä vain generoivaan funktioon ja saada kanonisen muunnoksen. Se mikä ei ole selvää, onko muunnos hyödyllinen. Se on sitä, jos Hamiltonin yhtälöt tulevat helpommiksi.
Tämä on motiivi Hamilton-Jacobin yhtälössä missä lähdetään hakemaan mahdollisimman helpon ongelman luovaa kanonista muunnosta ja sen generoivaa funktiota.