

Nachtrag letzte Vorlesung

Beispiel:



Berechnung von $S(r, \varphi, t)$ aus $H(r, \varphi, p_r = \frac{\partial S}{\partial p_r}, p_\varphi = \frac{\partial S}{\partial p_\varphi}, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$

Keine explizit zeitabhängigheit

H nicht explizit zeitabhängig $\rightarrow S = -Et + \bar{S}(r, \varphi)$

skaliere H-J-Gl: $H(r, \varphi, \partial_\varphi \bar{S}, \partial_r \bar{S}) = E$

H -Struktur erlaubt Ansatz $\bar{S}(r, \varphi) = S_r(r) + S_\varphi(\varphi)$ Separation d. Variablen

Mit Separationskonstante α_φ :

(a) $\partial_\varphi S_\varphi = \alpha_\varphi$, (b) $\partial_r S_r = \left(2m \left\{ E - m g r \cos \alpha - \frac{\alpha_\varphi^2}{2m r^2 \sin^2 \alpha} \right\} \right)^{1/2}$

Erinnerung: $S = S(\varphi, r, \underbrace{P_\varphi, P_r}_{P_k = \text{konstante}})$, $Q_k = \frac{\partial S}{\partial P_k}$

\uparrow $C_1 = \frac{\partial S}{\partial E}$, $C_2 = \frac{\partial S}{\partial \alpha_\varphi}$
 (Bsp) \uparrow $\frac{\partial S}{\partial E}$ \uparrow $\frac{\partial S}{\partial \alpha_\varphi}$
 unser Beispiel

$\left. \begin{matrix} P_\varphi \sim \alpha_\varphi \\ P_r \sim E \end{matrix} \right\} \text{w\u00e4hlen}$

Lsg. für S_φ : (a) $S_\varphi = \alpha_\varphi \varphi + S_0 \rightarrow$ einfach

Lsg. für S_r : (b) schwierig! aber machbar, hier nur Grenzfall: $\alpha_\varphi = 0$ (Rolle nach unten bei Start in Höhe h)

$\rightarrow S_\varphi = S_0 = \text{konstant}$

$S_r(r) \Big|_{\alpha_\varphi=0} = (2m)^{1/2} \left\{ E - m g r \cos \alpha \right\}^{3/2} \left(-\frac{2}{3} \frac{1}{m g \cos \alpha} \right)$

zu 4) f. $\kappa_p = 0$ f. wir zwei Konstante: C_1, E :

$$C_1 = \frac{\partial S}{\partial E} = - \underbrace{\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{u} g \cos \alpha}}_{\frac{\partial S_r(r)}{\partial E}} (E - u g r \cos \alpha)^{1/2} - t = C_1 = \underbrace{\frac{\partial (-Et)}{\partial E}}$$

Bewegungsgleichung, weil nach r umgeleitet \rightarrow Bahnkurve $r(t)$

$C_1, E =$ Konstante, werden über Anfangsbedingungen festgelegt

$$\frac{C_1^2 + 2C_1 t + t^2}{2} u g^2 \cos^2 \alpha = E - u g r \cos \alpha$$

a) $t=0, \dot{r}_0 = \dot{r}(t=0) = 0$

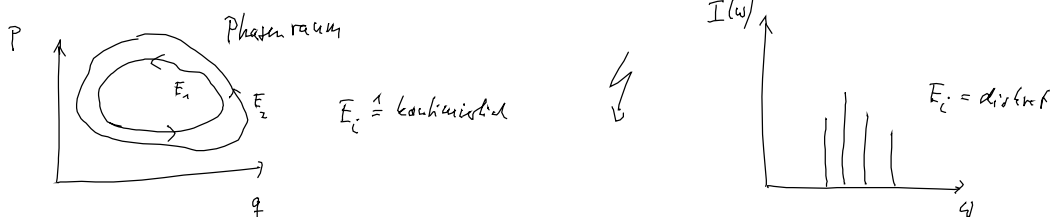
b) $t=0, r_0 = r(t=0) \neq 0$

$\rightarrow r = r_0 - \frac{t^2}{2} g \cos \alpha$: Start bei r_0 zur Zeit $t=0$,
effektive Beschleunigung in Kegeleichtung.

5. Schritte zur Quantenmechanik

5.1. Probleme mit Atomspektren

Elektronenbahn als Keplerproblem kann nicht diskrete E -Spektren
des atomaren Lichtemission / absorption erklären, weil alle Energien
erlaubt sind nach bisheriger Theorie



um 1900: Jahn (Sommerfeld, Bohr, u.a.) - wir bestimmen Bahnen zulassen

dazu Phasenraumintegral $\int_{\text{Bahn}} dq p(q) = J$ definiert, Einheit Wirkung

wenn man glaubt, daß Energieabstrahlung Sprung zwischen Bahn entspricht,
so dürfen wir diskrete Bahnen erlaubt sein, Ansatz:

$$J_{\text{Bahnperiode}} = \int_{\text{Bahn}} dq p(q) = n h \quad n: 1, 2, 3, \dots$$

Bahn $\hat{=}$ Fläche der umschriebenen Bahn

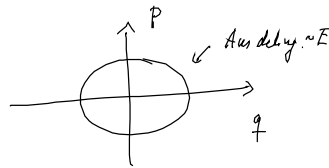
h : Wirkungsquantum (Experiment angepasst)

„Quantisierungsbedingung“

Beispiel: harmonischer Oszillator (1d) : p Impuls, q Lagekoordinate

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2} q^2 = E \rightarrow \text{Gleichung einer Ellipse}$$

kinet. E. potentielle E.



Bahnen entsprechen d. Quantisierung

$$\underbrace{\int dq p(q)}_{\text{Fläche der Ellipse}} = \pi \cdot \text{Halbachse} \cdot \text{Halbachse} = \pi \cdot 2 \sqrt{\frac{m}{k}} E = 2\pi E / \omega$$

$$\frac{2\pi E}{\omega} = n h \rightarrow E_n = n \frac{h}{2\pi} \omega$$

↑
diskrete Energie $\{E_n\}$

a) Quantisierungsbedingung führt auf diskrete Energien E_n

b) Plancksche Stellungsformel: auf Grundlage von strahlenden Oszillatoren mit E_n

c) geht aus f. H-Atom $\bar{E}_4 \approx -\frac{Ryd}{4^2}$

Ziel: H-J.-gl. / H-gl. muß in Form f. allgemeine Quantisierung gebracht werden.

S.2. H-J. Gl. als klassische Grenzfall der Schrödinger-Gleichung

Hamilton-Jacobi Gleichung: $-\frac{\partial}{\partial t} S(\vec{r}, \vec{p}, t) = H(\vec{r}, \vec{p} = \vec{\nabla}_{\vec{r}} S, t)$
 für Wirkung konstant
 ↓ atomare Dimensionen "Fiktion- / Wirkung gelte" klass. Teilchen: $\vec{p} = \vec{\nabla}_{\vec{r}} S$
"Beleggriff"

Schrödinger-Gleichung: $-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = H(\vec{r}, \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}}, t) \psi(\vec{r}, t)$
 für Wellenfunktion -----
 "Aufbauwahrscheinlichkeitsdichte" $|\psi(\vec{r}, t)|^2$
 "Begriff Bahnkurve" geht verloren.

Beispiel: freie Teilchen im Potent. $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$

H-J.-gl.: $-\frac{\partial}{\partial t} S = \frac{\vec{\nabla} S \cdot \vec{\nabla} S}{2m} + V(r) = \frac{(\vec{\nabla} S)^2}{2m} + V(r)$

Schr.-gl.: $-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(\frac{\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \cdot \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}}{2m} + V(r) \right) \psi = \left(\frac{-\hbar^2 \Delta}{2m} + V(r) \right) \psi$
↑
"Operator"

ähnlich, aber nicht identisch!

Zusammenhang S und ψ

freie Teilchen: $S = p_x x - \underbrace{\frac{p_x^2}{2m}}_{E_{kin}} t = \hbar (k_x x - \omega_{kin} t)$ Phase eine Well!

Ausatz: $\psi = \psi_0 e^{i \frac{S(\vec{r}, t)}{\hbar}}$ f. zeitl. ψ und S

kinetisch Energie ansetzen.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} \left(\psi_0 e^{i \frac{S(\vec{r})}{\hbar}} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi_0 \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} e^{i \frac{S(\vec{r})}{\hbar}}$$

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\nabla} e^{i \frac{S}{\hbar}} \right) &= \vec{\nabla} \cdot \left(e^{i \frac{S}{\hbar}} \cdot \frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} S \right) \quad \text{nach Produktregel} \\ &= \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 e^{i \frac{S}{\hbar}} \vec{\nabla} S \cdot \vec{\nabla} S + e^{i \frac{S}{\hbar}} \frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} S \end{aligned}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} \left(\psi_0 e^{i \frac{S}{\hbar}} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi_0 \left(-\frac{(\vec{\nabla} S)^2}{\hbar^2} + \frac{i}{\hbar} \Delta S \right) e^{i \frac{S}{\hbar}}$$

wenn $\hbar \rightarrow 0 \stackrel{!}{=} \text{klass. Grenzfall wie dies kontinuierliche Energie gibt}$

kinetisch reiner
stationäre Schrödinger gl.

$$\approx \frac{\psi_0 e^{i \frac{S}{\hbar}}}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 \quad (\text{nur 1. Term überlebt})$$

Die H-J-Gleichg. ist f. $\hbar \rightarrow 0$ die klassische Grenzfall der Schrödingergleichung

stationäre Schrödinger gl.

stationäre HJ-Gl.

$$\hat{E} \bar{\psi} = \left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(r) \right) \bar{\psi} \quad \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} \quad \bar{E} = \left(\frac{\nabla S}{2m} \right)^2 + V(r)$$

Ausatz: $\psi = \psi_0 e^{i \frac{\bar{E}}{\hbar} t}$

$$\bar{E} = -\hbar \dot{E} + \dot{S}$$

5.3. Poisson-Klammer

F, G sind Funktionen von (q_i, p_i)

Poisson-Klammer:
$$[F, G] = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial G}{\partial q_i} \frac{\partial F}{\partial p_i} \right)$$

a) Hamiltonformalismus in Poissonklammern

$$[q_j, H] = \sum_{i=1}^f \left(\delta_{ij} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \cdot \underbrace{\frac{\partial q_j}{\partial p_i}}_{=0} \right) = \frac{\partial H}{\partial p_j} \stackrel{\text{bekannt}}{=} \dot{q}_j$$

$$\dot{q}_j = [q_j, H] \quad \text{1. Hamiltongl. in Poissonklammernotation}$$

$$[p_j, H] = -\dot{p}_j \quad \text{2. Hamiltongl. in } -\text{a} - \text{, analoge Rechnung.}$$

b) noch eine Poissonklammer

$$[q_j, p_k] = \sum_{i=1}^f (\delta_{ij} \delta_{ik} - 0) = \delta_{jk}$$

5.4. Verbindung der Ideen (5.1. - 5.3.)

Schrödingergleichung: $\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$ in H ersetzen \hat{p} Impulsoperator $\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$

einheitsmechanisch $p_x = \hbar \partial_x$

Direktmechanisch $[x_i, p_j] \equiv x_i p_j - p_j x_i \neq 0$ (Kommutator)
 Poissonklammer $[x_i, p_j] = \delta_{ij}$ (Poissonklammer)

$$\rightarrow \left(x_i \frac{\hbar}{i} \partial_j - \frac{\hbar}{i} \partial_j x_i \right) \varphi = x_i \frac{\hbar}{i} \partial_j \varphi - \frac{\hbar}{i} \partial_j (x_i \varphi) = \underbrace{-\frac{\hbar}{i} \delta_{ij}}_{\text{Produktregel}} \varphi$$

$$[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

] formal Analogie zw Poissonklammer und Kommutator

Zugänge zu QM:

Schrödinger Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H(\vec{r}, \vec{p}) \psi$$

↑

H-J. Gleich.

Heisenberg Gleichg. f. Operatoren

$$\dot{A} = [A, H] \quad A = q_i, p_k \quad \text{als Operator}$$

↑

Poisson'sche Formelung