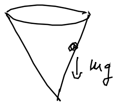
Nachtrag letzte Vorlesung

Beispiel:



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

Keine explizite Zeitabhängigkeit

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

stationäre 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 Separationskonstanten α_φ:

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

Erinnerung: $S = S(\varphi, r, \underbrace{P_\varphi, P_r}_{\underbrace{P_K = \text{Konstanten}}})$, $Q_K = \frac{\partial S}{\partial P_K}$ $\hat{=}$ $C_1 = \frac{\partial S}{\partial \underline{E}}$, $C_2 = \frac{\partial S}{\partial \underline{\alpha_\varphi}}$

unser Beispiel (Q_1)

$\left.\begin{array}{l} P_\varphi \sim \underline{\alpha_\varphi} \\ P_r \sim \underline{E} \end{array}\right\}$ wählen

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)

$\longrightarrow S_\varphi = S_0 = \text{Konstant}$

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

zu 4) f. $\kappa_\varphi = 0$ ∃ nur zwei Konstante: c_1, E:

$$c_1 = \frac{\partial S}{\partial E} = \underbrace{\underbrace{-\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{m}\, g\cos\alpha}\left(E - mgr\cos\alpha\right)^{1/2}}_{\frac{\partial}{\partial E} S_r(r)} \underbrace{- t}_{\frac{\partial}{\partial E}(-Et)}}_{} = c_1$$

Bewegungsgleichung, wenn nach r umgestellt → Bahnkurve $r(t)$

c_1, E = Konstanten, werden über Anfangsbedingungen festgelegt

$$\frac{c_1^2 + 2c_1 t + t^2}{2}\, m g^2 \cos^2\alpha = E - mgr\cos\alpha$$

a) $t = 0$, $\dot r_0 = \dot r(t=0) = 0$

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

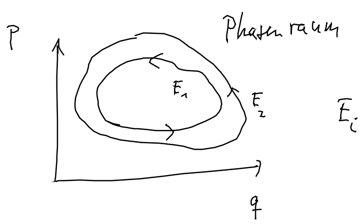
$$\to r = r_0 - \frac{t^2}{2}\underbrace{g\cos\alpha}_{} \quad : \text{Start bei } r_0 \text{ zur Zeit } t = 0,$$

effektive Beschleunigung in Kegelrichtung.

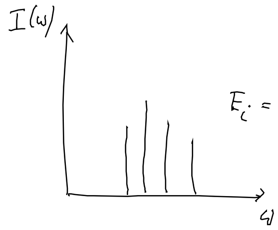
5. Schritte zur Quantenmechanik

5.1. Probleme mit Atomspektren

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



E_i ≙ kontinuierlich ↯



E_i = diskret

um 1900: Idee (Sommerfeld, Bohr, u.a.) – nur bestimmte 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 nur diskrete Bahnen erlaubt sein, Ansatz:

$$J_{\text{Bahnperiode}} = \underbrace{\oint_{\text{Bahn}} dq\, p(q)}_{\hat{=}\ \text{Fläche der umschriebenen Bahn}} = nh$$

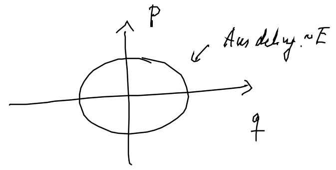
$n: 1, 2, 3 \ldots$

h: Wirkungsquantum (Experiment angepasst)

„Quantisierungsbedingg."

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

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



Bahnen eingeschränkt d. Quantisierung

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

$$\frac{2\pi E}{\omega} = nh \longrightarrow E_n = n\hbar\omega$$

$\uparrow$ diskrete Energie $\{E_n\}$

a) Quantisierungsbedingg. führt auf diskrete Energien E_n

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

c) gilt auch f. H-Atom $E_n \simeq -\frac{Ryd}{n^2}$

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

5.2. H-J. Gleichung als klassischer Grenzfall der Schrödingergleichung

Hamilton-Jacobi Gleichung für Wirkung : $-\partial_t S(\vec{r}, \cancel{\vec{P}}, t) = H(\vec{r}, \vec{p} = \vec{\nabla}_r S, t)$

Konstante

↓ atomare Dimension

„Führungs- / Wirkungswelle" klass. Teilchen : $\vec{p} = \vec{\nabla}_r S$

„Bahnbegriff"

Schrödingergleichung für Wellenfunktion $-\frac{\hbar}{i}\partial_t \Psi(\vec{r},t) = H\left(\vec{r}, \vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_r, t\right)\Psi(\vec{r},t)$

„Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte" $|\Psi(\vec{r},t)|^2$

„Begriff Bahnkurve" geht verloren.

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

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

Schr.-Gl.: $-\frac{\hbar}{i}\partial_t \Psi = \left(\frac{\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \cdot \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}}{2m} + V(r)\right)\Psi = \left(\frac{-\hbar^2 \Delta}{2m} + V(r)\right)\Psi$

↑ „Operator"

ähnlich, aber nicht identisch!

Zusammenhang S und Ψ

freies Teilchen: $S = p_x x - \underbrace{\frac{p_x^2}{2m}}_{E_{Kin}} t \;\hat{=}\; \hbar\,(k_x x - \omega_{Kin} t)$ Phase einer Welle!

Ansatz: $\Psi = \Psi_0 \, e^{i\frac{S(\vec r, t)}{\hbar}}$ f. Zshg Ψ und S

kinetische Energie ansehen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\vec\nabla\cdot\vec\nabla\left(\Psi_0\, e^{i\frac{S(\vec r)}{\hbar}}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_0\, \vec\nabla\cdot\vec\nabla\, e^{i\frac{S(\vec r)}{\hbar}}$$

$$\vec\nabla\cdot\left(\vec\nabla e^{iS/\hbar}\right) = \vec\nabla\cdot\left(e^{iS/\hbar}\cdot\frac{i}{\hbar}\vec\nabla S\right)$$, nach Produktregel

$$= \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 e^{iS/\hbar}\,\vec\nabla S\cdot\vec\nabla S + e^{iS/\hbar}\,\frac{i}{\hbar}\,\vec\nabla\cdot\vec\nabla S$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\vec\nabla\cdot\vec\nabla\left(\Psi_0\, e^{iS/\hbar}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_0\left(-\frac{(\vec\nabla S)^2}{\hbar^2} + \frac{i}{\hbar}\Delta S\right)e^{iS/\hbar}$$

wenn $\hbar \to 0$ ≙ klass. Grenzfall wie die kontinuierliche Energie gibt

$$\approx \frac{\Psi_0\, e^{iS/\hbar}}{2m}\left(\vec\nabla S\right)^2$$ (nur 1. Term überlebt)

kürzt sich raus
stationäre Schrödingergl.

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

stationäre Schrödingergl.

$$E\bar\Psi = \left(-\frac{\hbar^2\Delta}{2m} + V(r)\right)\bar\Psi \quad \xrightarrow[\hbar\to 0]{}$$

stationäre H.J.-Gl.

$$E = \left(\frac{\nabla\bar S}{2m}\right)^2 + V(r)$$

Ansätze: $\Psi = \Psi_0\, e^{i\frac{E}{\hbar}t}$

$S = -tE + \bar S$

5.3. Poissonklammernotation

F, G sind Funktionen von (q_i, p_i)

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

a) Hamiltonformalismus in Poissonklammern

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

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

$[p_j, H] = -\dot{p}_j$ 2. Hamiltongl. in – " – , 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 „Impulsoperator $\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$"

eindimensional $p_x = \frac{\hbar}{i} \partial_x$

Quantenmechanik $[x_i, p_j] \equiv x_i p_j - p_j x_i \neq 0$ (Kommutator)

Poissonklammer $[x_i, p_j] = \delta_{ij}$ (Poissonklammer)

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

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

$\exists$ formale Analogie zw. Poissonklammer und Kommutator

2 Zugänge zu QM:

Schrödingergleichung:

$$i\hbar\,\partial_t \Psi = H\left(\vec{r}, \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)\Psi$$

$\uparrow$

H-J. Glchg.

Heisenberggleichg. f. Operatoren

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

$\uparrow$

Poissonklammerformulierung