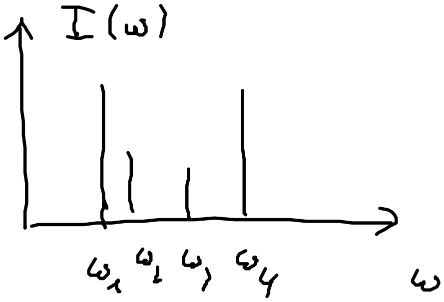
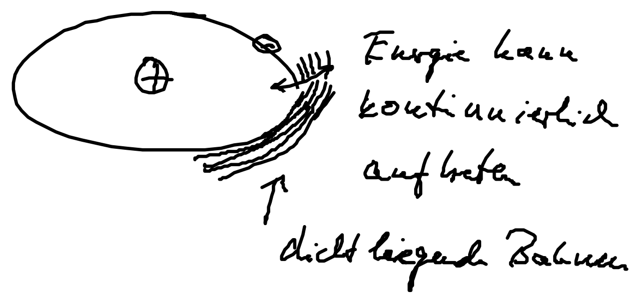
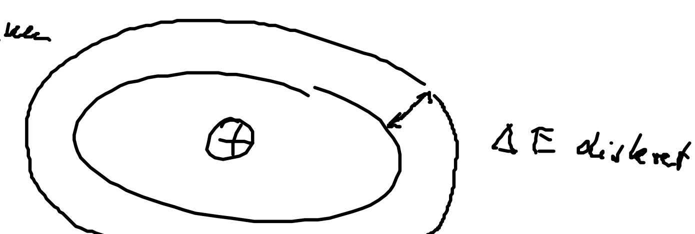
5. Analogiebetrachtungen zur Quantenmechanik

Elektronenbahnen als Keplerbewegung im Atom können nicht das diskrete Linienspektrum bei Lichtemission erklären



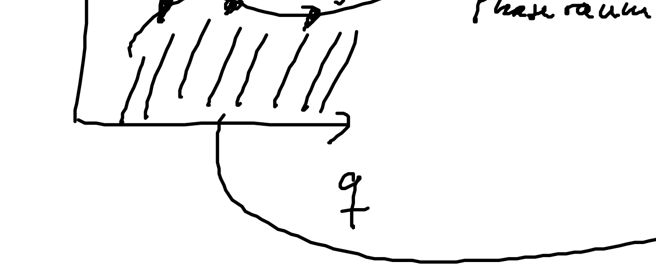


nur „Sprünge" zwischen diskreten Bahnen können Linien erklären



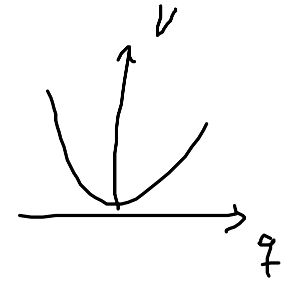
Idee zur Klärg. des Widerspruchs:

Betrachtg. im Phasenraum $p(t)$, $q(t)$ für 1d Bewegg.

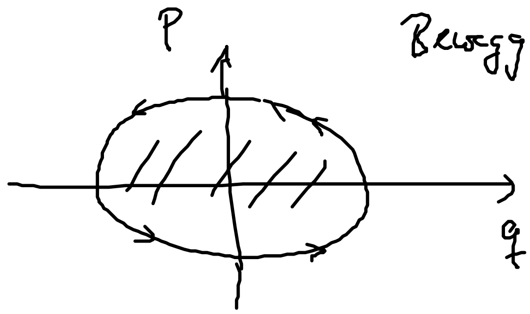


Phasenraumintegral definieren $J = \int dq\, p(q)$

Erläuterung am Bsp. d. harmonischen Oszillators



$$H = \underset{\text{kinet. E}}{\frac{p^2}{2m}} + \underset{\text{potentielle Energie}}{\frac{k}{2} q^2} = E$$



Bewegg. im Phasenraum ist Ellipse

($p^2 + q^2 \sim$ Konstante)

Halbachse: Masse, Kraftkonstante

periodische Bewegg.

$$J_{\text{period.}} = \underset{\text{Fläche d. Ellipse}}{\int dq\, p(q)} = 2\pi \underbrace{a \cdot b}_{\text{Halbachse}} = 2\pi E \sqrt{\frac{m}{k}}$$

$[J] = [S]$ wie $p = \frac{\partial S}{\partial q}$

Ansatz v. Sommerfeld / Bohr:

$$J = n\, h = 2\pi E \sqrt{\frac{m}{k}} = 2\pi E\, \omega^{-1}$$

natürliche Zahl   Einheit d. Wirkg. = Planck Konstante

$$\frac{h}{2\pi} = \hbar$$

$$E = n \hbar \omega = E(n) = E_n$$

führt zu diskreten Energien → Erklärung d. Linienspektren

→ Anwendg. auf H-Atom führt zu den richtigen Energien $E_n \sim \frac{1}{n^2}$

5.2. Hamilton-Jacobi Gleichg. als klassischer Grenzfall der Schrödingergleichg.

H-J. Gl. $\quad -\partial_t S(\vec{r}, \cancel{\vec{p}}, t) = H(\vec{r}, \underbrace{\vec{p} = \vec{\nabla}_r S}_{\vec{p} \text{ wird ersetzt}}, t)$

Parameter

$$S = S(\vec{r}, t)$$

Schrödingergleichg. $\quad -\frac{\hbar}{i}\partial_t \Psi(\vec{r}, t) = \underline{H}\left(\vec{r}, \vec{p} = \underline{\underline{\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_r}}, t\right)\Psi(\vec{r}, t)$

Operator der auf Ψ wirkt

Interpretation v. Ψ: $\quad |\Psi(\vec{r}, t)|^2$: Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

Bahnbegriff verliert sein Sinn

Schrödingergl. als Verallgemeinerg. d. H-J. Gleichung

Teilch. in Potential: $\quad H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{r})$

H-J.-Gl.: $\quad -\partial_t S = \frac{(\vec{\nabla} S)^2}{2m} + V(\vec{r}) \xrightarrow[S = -Et + \tilde{S}(\vec{r})]{\text{Separation}} \underline{\underline{E = \frac{(\vec{\nabla}\tilde{S})^2}{2m} + V(\vec{r})}}$

Schrödinger-gleichung

$$-\frac{\hbar}{i}\partial_t \psi = \left(\underbrace{\frac{\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\cdot\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}}{2m}}_{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta} + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r},t) \xrightarrow[\psi = \bar{\psi}(\vec{r})\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t}]{\text{Separation}} E\bar{\psi} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\bar{\psi}$$

aus der Schrödingergl. ist H-J. Gl. herleitbar:

$$\bar{\psi} = \bar{\psi}_0\, e^{i\bar{S}(\vec{r})/\hbar}$$

Motivation über die bekannten Phase in letzter VL

$$\underbrace{\bar{\psi}_0 = \text{konstant}}$$

Näherung um zu klass. Limes zu kommen

einsetzen

$$E\bar{\psi}_0\, e^{i\bar{S}/\hbar} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla} + V(\vec{r})\right)\bar{\psi}_0\, e^{i\bar{S}/\hbar}$$

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

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

$$+ \frac{i}{\hbar} e^{i\bar{S}/\hbar} \Delta \bar{S}$$

$\hbar \to 0$ $$\longrightarrow -\frac{1}{\hbar^2} e^{i\bar{S}/\hbar} (\vec{\nabla}\bar{S})^2$$

$\Downarrow$

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

Die H-J. Gl. ist der klassische Grenzfall der Schrödingergleichung..

5.3 Poissonklammern und Kommutatoren

andere Formulierung der Hamiltonmechanik $\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}$, $\dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}$

dazu definieren wir: Poissonklammer

sei F, G 2 Funktionen von q_i, p_i $F(q_i, p_i)$

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

$$(\{ \quad \})$$

Hamiltongl. in Poissonklammern?

$$\underline{[q_j, H]} = \sum_i \left(\delta_{ij}\, \partial_{p_i} H - 0\right) = \partial_{p_j} H = \underline{\dot{q}_j}$$

$$\dot{q}_j = [q_j, H] \qquad \text{analog} \quad -\dot{p}_j = [p_j, H]$$

in Quantenmechanik: Poissonklammer $\rightarrow$ Kommutator (Vertauscher)

$$[F, G] \rightarrow \underbrace{FG - GF}_{\text{Vertauschungsrelation}}$$

eine weitere Poissonklammer:

$$[q_j, p_k] = \sum_i \left(\delta_{ij}\, \delta_{ik} - 0\right)$$

$$[q_j, p_k] = \delta_{jk}$$

Kombination d. Idee v. Heisenberg / Bohr / Schrödinger

in Schrödinger taucht ein Impulsoperator $\underline{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r$ „—" Operator

in Kommutatoren v. Heisenberg steht auch Impulsoperator.

$$q_j \underline{p_k} - \underline{p_k} q_j \neq 0$$

wirkt auf Funktion

$$\left(q_j \frac{\hbar}{i}\partial_{q_k} - \frac{\hbar}{i}\partial_{q_k} q_j \right) f(q,p) =$$

$$\frac{\hbar}{i}\left(q_j \partial_{q_k} f - \partial_{q_k}(q_j f) \right) = -\frac{\hbar}{i}\delta_{ij} f = i\hbar\,\delta_{ij} f$$

Produktregel

$$\Longrightarrow [q_j, p_k] = i\hbar\,\delta_{jk}$$

analog z. Poissonklammer