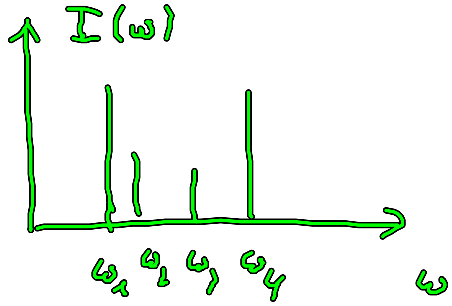
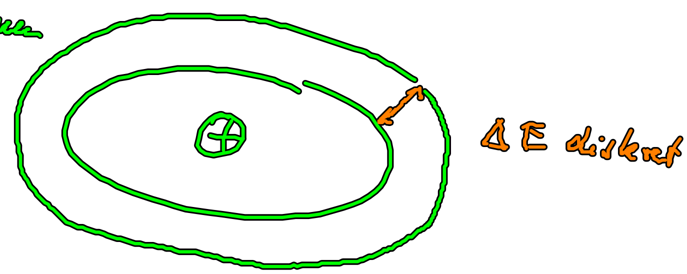
5. Analogiebetrachtungen zur Quantenmechanik

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

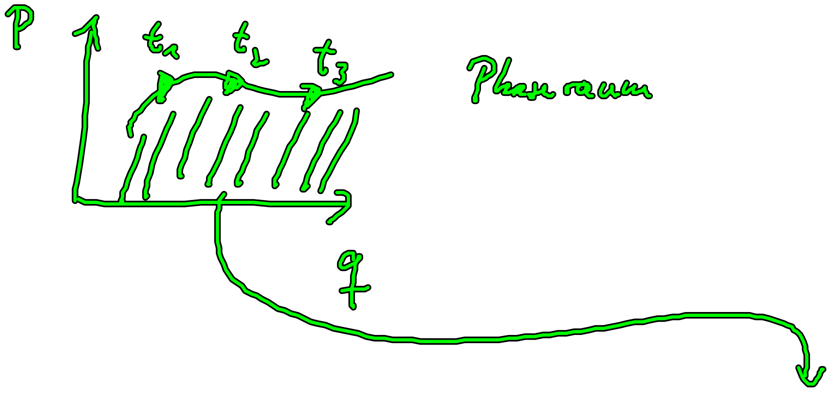


nur „Sprünge" zwischen diskreten Bahnen können Linien erklären



Idee zur Klärg. des Widerspruchs:

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

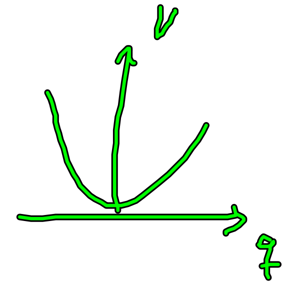


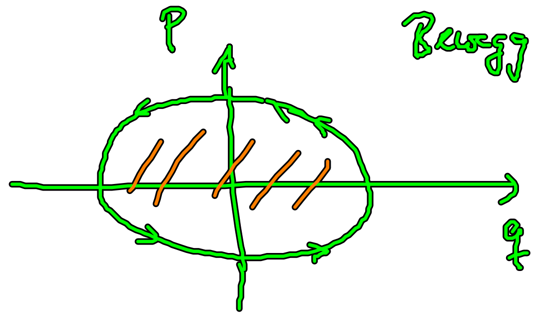
Phasenraumintegral definiere $J = \int dq\, p(q)$

Erläuterung am Bsp. d. harmonischen Oszillators

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2} q^2 = E$$

kinet. E potentielle Energie





Bewegg. im Phasenraum ist Ellipse

$(p^2 + q^2 \sim \text{Konstante})$

Halbachse: Masse, Kraftkonstante

periodische Bewegg.

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

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

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. Linienspektra

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

5.2. Hamilton-Jacobi Gleichung als klassischer Grenzfall der Schrödingergleichung

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

Parameter

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

Schrödingergleichung $$-\frac{\hbar}{i}\partial_t \Psi(\vec r, t) = \underline{H}\left(\vec r, \vec p = \frac{\hbar}{i}\nabla_r, t\right)\Psi(\vec r, t)$$

Operator der auf Ψ wirkt

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

Bahnbegriff verliert sein Sinn

Schrödingergl. als Verallgemeinerung d. H-J. Gleichung

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

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

Schrödinger-gleichung

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

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

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

Motivation über die bekannte Phase in letzter VL

$$\underbrace{\bar{\Psi}_0 = \text{konstant}}_{\text{Näherung um zu klass. Limes zu kommen}}$$

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 $F(q_i, p_i)$

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

$(\{ \quad \})$

Hamilton Gl. in Poissonklammern ?

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

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

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

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

die 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 Schrödingergl. taucht ein Impulsoperator $\hat{\vec p} = \frac{\hbar}{i} \vec\nabla_r$ $\hat{\ }$ — Operator

im Kommutator v. Heisenberg steht auch Impulsoperator.

$$q_j\, \hat p_k - \hat p_k\, q_j \neq 0$$

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 zu Poissonklammern