Kopplingar till kvantmekanik

Vi har sett tidigare att den kanoniska impulsen ges av

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$$

I kvantmekaniken låter vi $p_i \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}$ där p_i är den kanoniska impulsen (vilken ej behöver vara samma som den kinetiska). Detta kallas korrespondensprincipen.

Vi har också för Poissonparenteserna

$$[u, v] \longrightarrow \frac{1}{i\hbar}[\hat{u}, \hat{v}] = \frac{1}{i\hbar}(\hat{u}\hat{v} - \hat{v}\hat{u})$$

där u, v är klassiska funktioner och $\hat{u}, \hat{v}$ är kvantmekaniska operatorer.

EX. Vi har att

$$[q, p] = 1$$

Enligt ovanstående övergår detta till

$$[q, p] \longrightarrow \frac{1}{i\hbar}\underbrace{[\hat{q}, \hat{p}]}_{i\hbar} = 1$$

Vi såg tidigare att

$$\frac{dg}{dt} = [g, H] + \frac{\partial g}{\partial t}$$

I kvantmekaniken blir detta

$$\frac{d\hat{g}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{g}, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{g}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{g}] + \frac{\partial \hat{g}}{\partial t}$$

Heissenbergs rörelseekvation!

Vilket beskriver hur en operator utvecklas i tiden i <u>Heissenbergbild</u> (dvs med tidsberoendet i operatorerna istället för vågfunktionerna).

<u>Anm.</u> Egentligen är gången den omvända. Vi kan erhålla klassisk mekanik från kvantmekanik i de fall våra kvantmekaniska operatorer har någon klassisk motsvarighet.

<u>Ex/</u> Spinn-operatorn $\hat{S}_z$ utvecklas enligt

$$\frac{d\hat{S}_z}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{S}_z]$$

Detta har ingen klassisk motsvarighet.

— x —

Schrödingerbild → Heissenbergbild → Klassisk mekanik

I de fall klassisk motsvarighet finns

Schrödingerbild

$$i\hbar \frac{d}{dt}|A,t\rangle_S = \hat{H}|A,t\rangle_S$$

Skriv nu

$$|A,t\rangle_S = U|A,t_0\rangle_S$$

$$\Rightarrow \quad U = U(t,t_0) = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}$$

Definiera nu

$$|A,t\rangle_H = U^+|A,t\rangle_S = |A,t_0\rangle_S$$

för tillstånd och

$$O^H(t) = U^+ O^S U \qquad (*)$$

för operatorer

U är unitär, $U^+U = 1 \quad \Rightarrow \quad O^S = U O^H(t) U^+$
$|A,t\rangle_S = U|A,t\rangle_H$

$$\Rightarrow \quad {}_S\langle B,t|O^S|A,t\rangle_S = {}_H\langle B,t|U^+ U O^H(t) U^+ U|A,t\rangle_H =$$

$$= {}_H\langle B,t|O^H(t)|A,t\rangle_H$$ matriselement är invarianta

Derivera $(*)$ m.a.p. t

$$\frac{d}{dt}O^H(t) = \frac{d}{dt}(U^+O^SU) = \underbrace{\frac{dU^+}{dt}}_{\frac{iH}{\hbar}U^+}O^SU + U^+O^S\underbrace{\frac{dU}{dt}}_{\frac{-iH}{\hbar}U} + U^+\frac{\partial O^S}{\partial t}U =$$

$$= \frac{iH}{\hbar}U^+O^SU - \frac{i}{\hbar}U^+O^S\underbrace{HU}_{\substack{UH \\ \text{ty } [H,U]=0}} + \frac{\partial O^H}{\partial t} =$$

$$= \frac{i}{\hbar}(HO^H - O^HH) + \frac{\partial O^H}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}[H,O^H] + \frac{\partial O^H}{\partial t}$$

Vinkelverkansvariabler

För Keplerproblemet hade vi

$$\begin{cases} L = \frac{1}{2}mv^2 - U(r) = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) + \frac{A}{r} \\ p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r} \quad ; \quad p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2\dot{\varphi} \\ H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\varphi^2}{2mr^2} - \frac{A}{r} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad U_{eff} = \frac{\ell^2}{2mr^2} - \frac{A}{r}$$

Verkansvariablerna ges av $\quad$ sätt $p_r = \frac{\partial S'}{\partial r}$ där $\frac{\partial S_1}{\partial r}$ fås ur HJs ekv

$$J_r = \frac{1}{2\pi}\oint p_r\, dr = \ldots = -\ell + \frac{A}{2}\sqrt{\frac{2m}{-E}}$$

P.s.

$$J_\varphi = \frac{1}{2\pi}\oint p_\varphi\, d\varphi = \ell$$

$$\Rightarrow \quad K = E = -\frac{1}{2}\frac{mA^2}{(J_r + J_\varphi)^2}$$

Sätt nu (enligt Sommerfeld m.fl 1915)

$$\begin{cases} J_r = n_r \hbar \\ J_\varphi = n_\varphi \hbar \end{cases} \quad \text{med} \quad \begin{cases} \hbar = \frac{h}{2\pi} \\ h = \text{Plancks konstant} \\ n_r,\ n_\varphi - \text{heltal} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad E = -\frac{1}{2}\frac{mA^2}{(n_r + n_\varphi)^2\hbar^2}$$

Med $A = Ze^2$ och $n = n_r + n_\varphi$, $n = 1,2,3,\ldots$ är detta Bohrs uttryck för energinivåerna i väteliknande atomer!

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{mZ^2e^4}{n^2\hbar^2} \qquad n = 1,2,\ldots$$

Varför kvantiseras just verkansvariablerna?

Jo, de är s.k. <u>adiabatiska invarianter</u> (Ehrenfest 1914-16)

Detta innebär att om systemet utsätts för en långsamt varierande förändring, t.ex. genom att en kraft-konstant ändras, så är J_i i första approximationen konstanta och kan alltså fortsätta att vara kvantiserade med samma antal kvanta:

$$J_i = n_i \hbar$$

fix!

Hamilton-Jacobi & Schrödinger

Låt $H = \frac{1}{2m} p^2$ (fri partikel)

Hamilton-Jacobis ekv är separabel. $S^* = S_1^*(q) + S_2^*(t)$

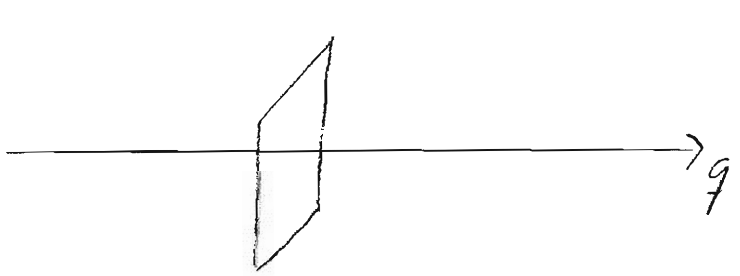
$$\Rightarrow \underbrace{\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S_1^*}{\partial q}\right)^2}_{\substack{\text{beror bara} \\ \text{av } q \\ \text{sätt} = \frac{\alpha^2}{2m}}} + \underbrace{\left(\frac{\partial S_2^*}{\partial t}\right)}_{\substack{\text{beror} \\ \text{bara} \\ \text{av } t \\ = -\frac{\alpha^2}{2m}}} = 0$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \left(\dfrac{\partial S_1^*}{\partial q}\right)^2 = \alpha^2 \\ \dfrac{\partial S_2^*}{\partial t} = -\dfrac{\alpha^2}{2m} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} S_1^* = \alpha q + \text{konst.} \\ S_2^* = -\dfrac{\alpha^2}{2m} t + \text{konst.} \end{cases}$$

Alltså gäller

$$S^*(q, \alpha, t) = \alpha q - \frac{\alpha^2}{2m} t + \text{konst}$$

Obs. att $S^* = \text{konst.}$ i konfigurationsrummet (q) definierar ett plan som är vinkelrät mot partikelbanan



$S^* = \text{konst.}$

Planet $S^* =$ konst rör sig med hastighet $\frac{\alpha}{2m}$ längs q-axeln.

Detta påminner om en plan våg med fashastighet

$$v_f = \frac{\alpha}{2m}.$$

Vad blir grupphastigheten för en superposition av dessa plana vågor?

$$v_g = v_f + k\frac{\partial v_f}{\partial k}$$

k - vågvektor

$$v_g = v_f + \alpha\frac{dv_f}{d\alpha} = \frac{\alpha}{2m} + \alpha\frac{1}{2m} = \frac{\alpha}{m}$$

Men för en fri partikel är ju hastigheten konstant. Kan den ha samma värde som v_g?

Vi vet att

$$p = \frac{\partial S^k}{\partial q} = \alpha$$

Alltså gäller

$$v_g = \frac{p}{m} \quad \text{eller} \quad p = mv_g$$

dvs partikeln rör sig vinkelrätt mot vågfronten $S^* =$ konstant och med grupphastigheten.

Inför nu funktionen

$$\Psi(q,t) = A' e^{\frac{i}{\hbar} S^*(q,t)}$$

$$= A e^{\frac{i}{\hbar}\left(\alpha q - \frac{\alpha^2}{2m} t\right)}$$

Då gäller

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial q}\Psi = \dfrac{i}{\hbar}\dfrac{\partial S^*}{\partial q}\Psi & (1) \\ \dfrac{\partial}{\partial t}\Psi = \dfrac{i}{\hbar}\dfrac{\partial S^*}{\partial t}\Psi & (2) \end{cases}$$

Ekv. (1) ger

$$\frac{\partial^2}{\partial q^2}\Psi = \frac{\partial}{\partial q}\left(\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S^*}{\partial q}\Psi\right) = \frac{i}{\hbar}\underbrace{\frac{\partial^2 S^*}{\partial q^2}}_{0}\Psi - \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S^*}{\partial q}\right)^2\Psi =$$

$$= -\frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S^*}{\partial q}\right)^2\Psi$$

Men $\left(\dfrac{\partial S^*}{\partial q}\right)^2 = -2m\dfrac{\partial S^*}{\partial t}$ enl. H.J ekv

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial q^2}\Psi = -\frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S^*}{\partial q}\right)^2\Psi = -\frac{1}{\hbar^2}\left(-2m\frac{\partial S^*}{\partial t}\right)\Psi = \frac{2m}{\hbar^2}\underbrace{\frac{\partial S^*}{\partial t}\Psi}_{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial t} \text{ enl. (2)}} =$$

$$= \frac{2m}{\hbar^2}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{2m}{\hbar^2}i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial q^2} = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Sätt nu $\mathcal{H} = \hbar$ och vi får

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2} = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}}$$

(Schrödinger 1926)

vilket är Schrödingerekvationen för en fri partikel!

ψ är vågfunktionen, med $|\psi|^2$ sannolikhetstätheten!

Omvänt har vi (mer allmänt)

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi}, \qquad \hat{H} \text{ – Hamiltonoperatorn}$$

med $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U$

Ansätt

$$\psi(q,t) = A\, e^{\frac{i}{\hbar} S^*(q,t)}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial S^*}{\partial t}\psi$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2} = \frac{i}{\hbar}\left(\frac{\partial^2 S^*}{\partial q^2}\right)\psi - \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S^*}{\partial q}\right)^2\psi$$

Sätt in i Schrödinger-ekvationen

$$\Rightarrow i\hbar \cdot \frac{i}{\hbar}\frac{\partial S^*}{\partial t}\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\partial^2 S^*}{\partial q^2}\right) - \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S^*}{\partial q}\right)^2\right) + U\right]\psi$$

$$\Rightarrow \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S^*}{\partial q}\right)^2 + U\right] + \frac{\partial S^*}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2 S^*}{\partial q^2}\right) \qquad (*)$$

Vänsterledet känner vi igen som vår nya Hamiltonian om S^* är verkansfunktionen. Högerledet ska ju då vara noll, doch!

Termen i H.L kan försummas om

$$\hbar \left(\frac{\partial^2 S^*}{\partial q^2} \right) << (\nabla S)^2$$

$$\Rightarrow \quad \hbar \frac{\partial p}{\partial q} << p^2$$

Med $\lambda = \frac{h}{p}$; $\lambda\!\!\!^{-} = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{\hbar}{p}$ kan detta skrivas

$$\frac{\lambda\!\!\!^{-}}{p} \frac{\partial p}{\partial q} << 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{(\partial p / \partial q)}{(p / \lambda\!\!\!^{-})} << 1$$

Dvs, när våglängden är så kort att rörelsemängden varierar försumbart lite över en våglängd, då kan vi sätta H.L i (*) till noll och vi får tillbaka vår klassiska Hamilton-Jacobi-ekvation.

<u>Anm</u> Enklast får vi den klassiska gränsen genom att låta $\hbar \to 0$