Kapitel XI WKB

Semiklassik // Zusammenh. zw. QM & klassisch → WKB Näherung

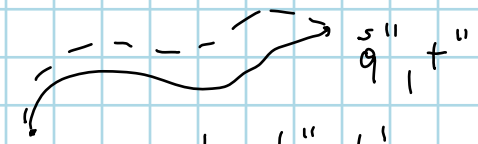
klassische Dynamik – **Hamilton Jacobi Formulierung**

Einführung d. Lagrange Fkt.

$$\mathcal{L}(q_k, \dot{q}_k, t) = T(q_k, \dot{q}_k) - V(q_k, t)$$

Bsp. $T = \frac{p^2}{2m} = \frac{m\dot{q}^2}{2}$ $\qquad p := \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} = m\dot{q}$

Wirkung (S)



Wirkung ist für irgendeinen Pfad definiert ...

$$S = \int_{t'}^{t''} dt \; \mathcal{L}(q(t), \dot{q}(t), t)$$

Wirkung f. klassischen Pfad hat Extremwert gilt auf d. ganzen Pfad ...

$$\frac{\delta \mathcal{L}}{\delta q_k} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k}\right) = 0$$

ist ein Zugang equival. zu Newtonschen Gl.

Wir machen es anders

2 Sachen: 1) Hamilton Jacobi herleiten
2) Im Falle einer Zeitabh. obere Gl. umschreiben

$$H := \sum_k \dot{q}_k \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}}_{p_k} - L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}) = T + V = E(t)$$

<u>H zeitunabhängig</u> – E konstant // ein Fall z.B.

$\frac{\partial S}{\partial t} = -E(t)$ reduzierte Wirkung: $\tilde{S}$ // nur bei H zeitunabh.

$$\tilde{S} = S + Et = S + \int_{t'}^{t''} H\,dt = \int_{t'}^{t''} (L + H) =$$

$\int_{t'}^{t''} 2T\,dt$ ← Energieabhängigkeit abgespalten

$$= \int_{t'}^{t''} \underbrace{m \dot{q}_k}_{p_k} \underbrace{\dot{q}_k}_{\frac{\partial q_k}{\partial t}} dt = \int_{t'}^{t''} p_k \frac{\partial q_k}{\partial t} dt \overset{*_1}{=} \int_{q'}^{q''} p_k\,dq_k$$

$= \tilde{S}$

$*_1$ Variablentrafo; für diese Rechnung hat man den Pfad schon gefunden & will das S ausrechnen.

Jetzt wollen wir auf Kanonische Jacobi kommen...

kann man zeigen: $\frac{\partial S}{\partial q_k''} = p_k''$ $\quad \frac{\partial S}{\partial q_k'} = -p_k'$ // siehe Pfad

// kann man allg. für zeitabhängige H zeigen

$$H(\vec{q}, \vec{p}, t) = H(\vec{q}, \underbrace{\frac{\partial S}{\partial \vec{q}}}_{\nabla S}, t)$$

<u>Einführung von H an. Jacobi:</u>

$$H\left(\vec{q}, \frac{\partial S}{\partial \vec{q}}, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

falls $\frac{\partial S}{\partial t} = -E(H)$ ist // dann $H = \in(H)$ ...

jedoch alles mit der Wirkung form.

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{q}) = \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(\vec{q})$$

$\rightarrow$ Hamilton Jacobi: $\boxed{\frac{(\nabla S)^2}{2m} + V + \frac{\partial S}{\partial t} = 0}$

Ende d. klassischen Mechanik.

Gesucht: Zusammenhang zw. QM & klassisch

<u>ausgehend von SGL:</u>

XI.1 $\quad \psi(\vec{x},t) = A(\vec{x},t)\, e^{\frac{i}{\hbar} S(\vec{x},t)}$

A & S reell wählen – ist erlaubt

Einsetzen in SGL: $\quad \dot{\psi} = (\dot{A} + A \frac{i}{\hbar} \dot{S})\, e^{\frac{i}{\hbar} S}$

$$\Delta\psi = \nabla\left[\left((\nabla A) + A\frac{i}{\hbar}(\nabla S)\right) e^{\frac{i}{\hbar}S}\right] =$$

$$= \left((\Delta A) + 2\nabla A \frac{i}{\hbar}\nabla S + A\frac{i}{\hbar}\Delta S - \frac{1}{\hbar^2}(\nabla S)^2\right) e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{x},t)}$$

SGL: $\quad \left(i\hbar\frac{\dot{A}}{A} - \dot{S}\right) A e^{\frac{i}{\hbar}S} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\Delta A}{A} + \frac{2i\nabla A \nabla S}{\hbar A} + \frac{i}{\hbar}\Delta S - \frac{1}{\hbar^2}(\nabla S)^2\right) A e^{\frac{i}{\hbar}S} + V A e^{\frac{i}{\hbar}S}$

Realteil: $\quad -\dot{S} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta A}{A} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V$

$$\boxed{\frac{(\nabla S)^2}{2m} + V + \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta A}{A}}$$

Quellterm ist bei Hamilt. Jacobi = 0

Imaginärteil später

Zeitunabh. Fall

$$\psi(\vec{x},t) = u(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}tE}$$

$$u(\vec{x}) = \psi(\vec{x},t)\, e^{\frac{i}{\hbar}tE} = A(\vec{x})\, e^{\frac{i}{\hbar}\overbrace{(S(\vec{x},t) + Et)}^{\tilde{S}}}$$

Realteil: $(\nabla \tilde{S})^2 = 2m(E-V) + \hbar^2 \frac{\Delta A}{A}$

$\hbar^2 \frac{\Delta A}{A}$ ↓ Störterm

Imaginärteil: $0 = \Delta \tilde{S} + 2 \nabla \tilde{S} \frac{\nabla A}{A}$

exakt im zeitunabh. Fall

einfach im 1 dim Fall: Lsg d Imaginärteils

andere Namenkleben: $\tilde{S}'' = \Delta S$

$$\frac{1}{2}\frac{\tilde{S}''}{\tilde{S}'} + \frac{A'}{A} = 0$$

$$-\frac{1}{2}\frac{d}{dx}\log \tilde{S}' = \frac{d}{dx}\log A$$

$$-\frac{1}{2}\log(\tilde{S}') = \log A + C'$$

$$\left(\frac{d\tilde{S}}{dx}\right)^{-\frac{1}{2}} = C \cdot A$$

WKB - Näherung

Realteil: $\left(\frac{d\tilde{S}}{dx}\right)^2 = 2m(E-V) + \hbar^2 \cdot \ldots$ (durchgestrichen)

// $\hbar^2$ soll klein sein

$$\frac{d\tilde{S}}{dx} = \pm\sqrt{2m(E-V(x))}$$

klassisch

funkt nur klassisch

$$\tilde{S}(x) = \pm \int_{x_0}^{x} dx' \sqrt{2m(E-V(x'))} := \pm \int dx'\, p(x')$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{p}}$$

XI . 15

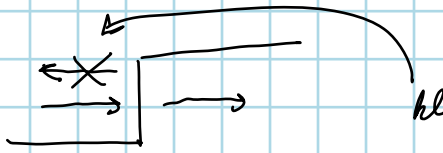
$$u(x) = \frac{C_+}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x} dx' p(x')} + \frac{C_-}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x} dx' p(x')}$$

Lsg divergiert wenn $p \to 0$ geht

Umkehrpunkt: $E - V$ wäre $\emptyset$, man darf Term nicht streichen

// betrachte $C_- = \emptyset$ // nur eine Richtung d Welle

$$j = \frac{\hbar}{2mi}\left(u^* u' - u (u^*)'\right) = \frac{\hbar}{2mi} \frac{|C_+|^2}{p(x)} \left(\frac{i}{\hbar} p(x) + \frac{i}{\hbar} p(x)\right)$$



$$= \frac{|C_+|^2}{m} \qquad *_1$$

// Strom ist bewahrt auch bei $p = \emptyset$! liegt an d Näherung

Geht QM nicht ! Ist ein klassischer Effekt

*1 Ableitungsterme heben sich auf ?

Gültigkeit der Näherung :

$$\hbar^2 \frac{1}{A} \frac{d^2 A}{dx^2} << 2m(E-V) = p(x)^2$$

$$\hbar^2 \frac{3(p')^2 - 2pp''}{4p^2} << p^2$$

// 2. Term wird ignoriert auf linker Seite

p'' soll sehr klein sein

Argument größer (Wellenlänge)

$$\frac{|\hbar p'|^2}{p^2} << p^2$$

$$\left|\frac{dp}{dx}\right| << \frac{1}{\hbar} p^2$$

// $p = \hbar k$ zusammen k & λ

// umschreiben auf Wellenlänge

$$p(x) = \frac{2\pi\hbar}{\lambda(x)} \longrightarrow \left|\frac{d}{dx}\lambda(x)\right| << 2\pi$$

λ darf sich nicht schnell ändern & $E - V$ muss positiv sein