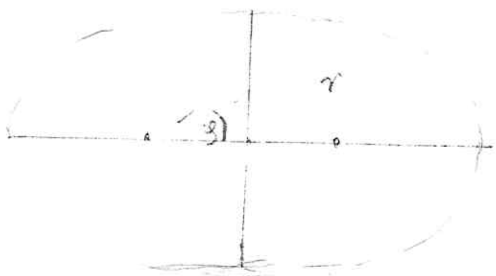
V Beispiele für erzeugende Funktionen alias Wirkungsfunktionen und deren Rolle bei der Quantelung und Energiebestimmung.

Wir geben für das im Vorstehenden Gesagte zwei für die ganze Physik gewichtige Beispiele.

a.) Das Wasserstoffatom als Keplerproblem

Kinetische und potentielle Energie lassen sich in den verallgemeinerten Lagekoordinaten φ und r unmittelbar aus der Anschauung bestimmen. Siehe dazu Fig. 1 !



Die Lagerangefunktion ist

$$L(q,\dot q) = E_{kin} - U$$
$$= \frac{1}{2m}(\dot r^2 + r^2\dot\varphi^2) + \frac{e^2}{r}$$

und mit den Gleichungen (3) die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{1}{2m}(\dot r^2 + r^2\dot\varphi^2) - \frac{e^2}{r} = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{1}{r^2}p_\varphi^2\right) - \frac{e^2}{r} = E.$$

Darin kommt die Winkelvariable φ explizit nicht vor, so daß mit Gl. (3) $\dot p_\varphi = \frac{\partial H}{\partial \varphi} = 0$ gilt und also der Drehimpuls konstant, nämlich gleich dem Zweifachen der "Flächenkonstanten" $p_\varphi = 2c_F$ ist. Mit den ersten der Transformationsgleichungen (11) wird die H. J. Diffgl. (18) aufgrund der obigen Hamiltonfunktion

$$\frac{1}{2m}\left(\left(\frac{\partial S^*}{\partial r}\right)^2 + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial S^*}{\partial \varphi}\right)^2\right) - \frac{e^2}{r} = E .$$

Zu ihrer Lösung wählt man als neue "Koordinaten" die Energiekonstante $E = Q_1$ und die zweifache Flächenkonstante $p_\varphi = \frac{\partial S^*}{\partial \varphi} = 2c_F = Q_2$, womit nach der einzigen noch nicht bestimmten ~~Größe~~ Koordinate

Nach diesem Vorbild heißen alle in H nicht vorkommenden Variablen "zyklisch".

$$p_r = \frac{\partial S^*}{\partial r} = p_r = \sqrt{2m\left(Q_1 + \frac{e^2}{r}\right) - \frac{1}{r^2} Q_2^2}$$

aufgelöst werden kann. Damit ist

$$S^* = \int \frac{\partial S^*}{\partial \varphi} d\varphi + \int \frac{\partial S^*}{\partial r} dr = \int p_\varphi d\varphi + \int p_r dr .$$

Lösungsfunktion der obigen Differentialgleichung und

$$S = -Q_1 t + \int Q_2 \, d\varphi + \int \sqrt{2m\left(Q_1 + \frac{e^2}{r}\right) - \frac{1}{r^2} Q_2^2} \, dr$$

ein vollständiges Integral der allgemeinen H. J.-Diffgl. (~~12~~ 11),
woraus sich sofort wieder die beiden schon formulierten Transformationsgleichungen

$$p_\varphi = \frac{\partial S^*}{\partial \varphi} = \frac{\partial S}{\partial \varphi} \quad \text{und} \quad p_r = \frac{\partial S^*}{\partial r} = \frac{\partial S}{\partial r} ,$$

sowie die gemäß Gl. (11) noch fehlenden beiden

$$P_1 = -\frac{\partial S}{\partial Q_1} = t_0 = t - m \int \left[2m\left(Q_1 + \frac{e^2}{r}\right) - \frac{1}{r^2} Q_2^2\right]^{-1/2} dr ,$$

$$P_2 = -\frac{\partial S}{\partial Q_2} = -\varphi_0 = -\varphi + Q_2 \int \left[2m\left(Q_1 r^4 + e^2 r^3\right) - Q_2^2 r^2\right]^{-1/2} dr$$

ergeben. Wegen K (Q, P) $\equiv$ 0 sind nach Gl. (~~7~~ 6) auch die neuen "Impulskoordinaten" P_1 und P_2 (Integrations-)Konstante, über die in ersichtlicher Weise verfügt wurde. Durch Bestimmung des Integrals ergibt sich aus der letzten Gleichung die Brennpunktsgleichung eines Kegelschnitts $r = \varrho/(1+\varepsilon\cos(\varphi-\varphi_0))$ mit dem Halbparameter $\varrho = Q_2^2/me^2$ und der numerischen Exzentrizität $\varepsilon = (1 + 2Q_1Q_2^2/me^4)^{1/2}$. Aus den beiden letzten Gleichungen zusammen folgt die zeitliche Durchlaufung der Bahn $\varphi = \varphi(t)$, $r(t)$ (insbesondere in Form der Keplerschen Gleichung), welche hier explizit nicht benötigt wird, da es schon in der alten Quantentheorie viel weniger auf die Bahnbestimmung, als auf die Bestimmung der Energie ankommt. Die Energie $E = Q_1$ ergibt sich aus der Hamiltonfunktion am einfachsten, wenn darin die Werte für das "Perihel" eingesetzt werden. Mit $r_{min} = \varrho/(1+\varepsilon)$ und $p_{r_{min}} = 0$ folgt $E = -\frac{e^2}{2}\frac{me^2}{Q_2^2}(1+\varepsilon)(1-\varepsilon)$. Bei Beschränkung auf Ellipsenbahnen, d. h. $\varepsilon < 1$, läßt sich dafür mit dem Aphelabstand $r_{max} = \frac{Q_2^2}{me^2}\frac{1}{1-\varepsilon}$ auch $E = -\frac{e^2}{2}\Big/\sqrt{r_{min}\, r_{max}} = -\frac{e^2}{2a}$ schreiben, wo a die große Halbachse angibt, wie aus der Definition der Ellipse folgt.

Die klassische Quantentheorie greift in die obige Darstellung mit der axiomatischen Forderung ein, daß jeder Summand der Erzeugenden S^* bei einem vollen Bahnumlauf gleich einem ganzen Vielfachen des Planckschen Wirkungsquantums sei. Es soll also für die Phasenintegrale (Periodizitätsmoduln)

$$\oint \frac{\partial S^*}{\partial \varphi} d\varphi = \oint p_\varphi d\varphi = \int_0^{2\pi} Q_2 \, d\varphi = 2\pi Q_2 = J_\varphi h \,, \quad J_\varphi = 1, 2, \,,$$

$$\oint \frac{\partial S^*}{\partial r} dr = \oint p_r dr = 2 \int^{r_{max}} \sqrt{2m\left(Q_1 + \frac{e^2}{r}\right) - \frac{1}{r^2} Q_2^2} \; dr$$

$$= 2\pi \left(\frac{m e^2}{\sqrt{-2mQ_1}} - Q_2 \right) = J_r h \,, \quad J_r = 0, 1, 2 .$$

gelten. Aus der Addition ~~der~~ dieser Phasenintegrale ergibt sich sofort die gequantelte Energie

$$E = -\frac{e^2}{2} \frac{m e^2}{\hbar^2} \frac{1}{(J_\varphi + J_r)^2} = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{a_B J^2} \,, \quad J = J_\varphi + J_r = 1, 2, \ldots .$$

Dieser Wert reproduziert sich (natürlich!) aus dem oben angegebenen klassischen Wert, wenn darin auf der rechten Seite die gequantelten Werte

$$Q_2 = J_\varphi \hbar \quad \text{und} \quad \varepsilon = \sqrt{1 + 2 Q_1 Q_2^2 / (m e^4)} = \sqrt{1 - J_\varphi^2 / (J_\varphi + J_r)^2}$$

eingesetzt werden.

b.) Massenpunkt in einem ebenen Kraftfeld. Wir betrachten einen harmonischen Oszillator, spezialisieren also auf ein lineares Kraftgesetz, sodaß die Kraftkomponenten in x-resp. y- Richtung $f_x = -\alpha x$ und $f_y = -\beta y$ sind, woraus sogleich die potentielle Energie $U = \frac{1}{2}\alpha x^2 + \frac{1}{2}\beta y^2$ und damit die Hamiltonfunktion $H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}\alpha x^2 + \frac{1}{2}\beta y^2$ folgen. Die Anfangsbedingung für $t = 0$ sei $p_x = p_y = 0$.

Man wählt nun als neue Koordinaten die zu t = 0 gehörigen Auslenkungen $x_0 = Q_1$ und $y_0 = Q_2$, womit schon über alle Integrationskonstanten verfügt und die Energiekonstante festgelegt ist;

$E = \frac{1}{2}\alpha Q_1^2 + \frac{1}{2}\beta Q_2^2$. Die zugehörige H. J.-Diffgl. (18) ist

$$\frac{1}{m}\left(\frac{\partial S^*}{\partial x}\right)^2 + \frac{1}{m}\left(\frac{\partial S^*}{\partial y}\right)^2 + \alpha x^2 + \beta y^2 = \alpha Q_1^2 + \beta Q_2^2 ,$$

die sich mit dem Ansatz

$$S = -(\alpha Q_1^2 + \beta Q_2^2)t + S_x^*(x,Q) + S_y^*(y,Q)$$

in zwei gewöhnliche Differentialgleichungen separieren läßt;

$$\left(\frac{dS_x^*}{dx}\right)^2 - m\alpha(Q_1^2 - x^2) = \left(\frac{dS_y^*}{dy}\right)^2 - m\beta(Q_2^2 - y^2) = 0 .$$

Daraus ergibt sich durch Quadratur

$$S_x^* = \sqrt{m\alpha}\int\sqrt{Q_1^2 - x^2}\,dx = \frac{1}{2}\sqrt{m\alpha}\left(x\sqrt{Q_1^2 - x^2} + Q_1^2 \arcsin\frac{x}{Q_1}\right),$$

$$S_y^* = \sqrt{m\beta}\int\sqrt{Q_2^2 - y^2}\,dy = \frac{1}{2}\sqrt{m\beta}\left(y\sqrt{Q_2^2 - y^2} + Q_2^2 \arcsin\frac{y}{Q_2}\right).$$

Aus den zweiten der Transformationsgleichungen (11) erhält man wie im ersten Beispiel die Bahngleichungen $x(t)$, $y(t)$, hier die Lissajousfiguren. Auf die Ausrechnung der Bahngleichung verzichten wir auch in diesem Beispiel und berechnen sogleich mit den ersten der Transformationsgleichungen (11) die Phasenintegrale und quanteln diese;

$$\oint \frac{\partial S^*}{\partial x}dx = \oint \frac{dS_x^*}{dx}dx = \oint p_x\,dx = 4\sqrt{m\alpha}\int_0^{Q_1}\sqrt{Q_1^2 - x^2}\,dx = \sqrt{m\alpha}\,Q_1^2 = J_x h ,$$

$$\oint \frac{\partial S^*}{\partial x}dx = \oint \frac{dS_y^*}{dx}dy = \oint p_y\,dx = 4\sqrt{m\beta}\int_0^{Q_2}\sqrt{Q_2^2 - y^2}\,dx = \sqrt{m\beta}\,Q_2^2 = J_y h .$$

Daraus ergibt sich die quantentheoretische Gesamtenergie aus der klassischen Energiekonstanten

$$E = \frac{1}{2}(\alpha Q_1^2 + \beta Q_2^2) = \left(\sqrt{\frac{\alpha}{m}}\,J_x + \sqrt{\frac{\beta}{m}}\,J_y\right)h = (J_x\omega_x + J_y\omega_y)\hbar .$$

VI Der Virialsatz im Beispiel des Keplerproblems

Aus der oben ermittelten Gesamtenergie des Keplersystems

$$\frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{1}{r^2}Q_2^2\right) - \frac{e^2}{r} = -\frac{1}{2}\frac{e^2}{a} = E\ (\equiv Q_1)$$

folgt mit r = const. = a und damit $p_r = 0$, d.h. für Kreisbahnen, sofort

$$E_{kin} = \frac{1}{2m}\frac{1}{a^2}Q_2^2 = \frac{1}{2}\frac{e^2}{a} = -\frac{1}{2}U = -E ,$$