1. Übung zur Quantenmechanik I — Musterlösung

1. Bohr-Sommerfeldsche Quantentheorie

a) Koordinaten: r (Abstand) Impulse: p_r (Radialimpuls)
ϕ (Winkel) p_ϕ (Drehimpuls)

ϕ ist zyklisch $\left[\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi} = 0\right] \Rightarrow p_\phi$ erhalten.

b) $p_\phi =: L = \text{const} \Rightarrow \oint d\phi \; p_\phi = 2\pi L = h\ell$ oder $L = \hbar\ell$.

«Nebenquantenzahl» $\ell = 1, 2, \ldots$

Für den radialen Freiheitsgrad gilt (Energieerhaltung):

$$p_r^2 = 2mE - \frac{L^2}{r^2} + \frac{2me^2}{r}$$
$$\Rightarrow \oint dr \; \left\{ \pm\sqrt{2mE - \frac{L^2}{r^2} + \frac{2me^2}{r}} \right\} = hn_r$$

«Radiale Quantenzahl» $n_r = 1, 2, \ldots$

c) Elementare Umformungen liefern die im *Hinweis* gegebene Form,

$$hn_r = \sqrt{\frac{2me^4}{-E}} \oint ds \; \left\{ \pm\sqrt{-1 - \frac{a^2}{s^2} + \frac{1}{s}} \right\}. \qquad (a^2 = -EL^2 \,/\, 2me^4)$$

Das Vorzeichen lässt sich durch eine geometrische Überlegung bestimmen: Von einem Hauptscheitel zum anderen gilt ein Vorzeichen, am «Rückweg» das umgekehrte. An den Hauptscheiteln ist $p_r \propto \dot{r} = 0$, damit ergibt sich

$$\oint ds \;\; \{\pm\sqrt{\cdots}\} = 2\int_{r_1}^{r_2} dr \; \sqrt{\cdots}.$$

Anwendung der Formel im *Hinweis* liefert

$$\sqrt{\frac{2me^4}{-E}} - 2\hbar\ell = 2\hbar n_r$$

d) Klassisch gibt es (außer $E < 0$ für gebundene Zustände) keine Einschränkung für die Energie. Die Sommerfeld-Quantisierung liefert die gleichen Energieniveaus

$$E = -\frac{me^4}{2\hbar^2(n_r + \ell)^2}$$

wie das Bohrmodell, aber bereits mit der richtigen Multiplizität.

Verbindung zum Bohrmodell: «Hauptquantenzahl» $n = n_r + \ell$.

Wiederholung: Lineare Algebra

a) H ist hermitesch und unitär.

Aus der Hermitizität folgt $E \in \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned} E &= (\Psi, H\Psi) \\ E^* &= (H\Psi, \Psi) \\ &= (\Psi, H\Psi) \\ &= E; \end{aligned}$$

sowie die Vollständigkeit der Eigenbasis $\{\Psi^{(i)}\}$.

Aus der Unitarität folgt $|E| = 1$:

$$\begin{aligned} H\Psi &= E\Psi \\ H^2\Psi &= HE\Psi \\ H\Psi &= E^2\Psi \end{aligned}$$

b) Trivial sind

$$\Psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ zu } E_1 = +1, \qquad \text{und} \qquad \Psi_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ zu } E_4 = +1.$$

Diagonalisierung von $\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ liefert die verbleibenden

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} \text{ zu } E_2 = +1, \qquad \text{und} \qquad \Psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix} \text{ zu } E_3 = -1,$$

Die Eigenwerte ± 1 haben also jeweils Multiplizität 2.

c) Die 4 Eigenvektoren sind linear unabhängig und bilden daher einer vollständige Basis dieses 4-dimensionalen Raums.