Technische Universität
Wien

Prof. Dr. K. Held
Prof. Dr. A. Toschi, Dr. J. Tomczak
Dipl.-Ing. G. Rohringer, Dipl.-Ing. T. Schäfer

1. Übung zur Quantenmechanik I

Wintersemester 2013/2014

TUTORIUM: Freitag, 11.10.2013.

Wiederholung: Klassische analytische Mechanik

In der **Lagrange-Formulierung** der klassischen Mechanik wird der Zustand eines klassischen mechanischen Systems durch verallgemeinerte Koordinaten ($q_1, \ldots, q_R$) und Geschwindigkeiten ($\dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_R$) eindeutig festgelegt (R bezeichnet die Anzahl der Freiheitsgrade des Systems). Die Lagrange-Funktion $\mathcal{L} \equiv \mathcal{L}(q_1, \ldots, q_R\,;\, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_R)$ führt auf folgenden Satz von Bewegungsgleichungen (R Differentialgleichungen zweiter Ordnung):

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}\right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} \;=\; 0\,, \quad i \in \{1, 2, \ldots, R\}\,.$$

Nach Transformation in den **Hamilton-Formalismus** lässt sich der Zustand eines mechanischen Systems eindeutig durch je R verallgemeinerte Koordinaten und Impulse festlegen. Die verallgemeinerten (konjugierten) Impulse sind durch $p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}$ und die klassische Hamilton-Funktion durch

$$\mathcal{H} \;\equiv\; \mathcal{H}(q_1, \ldots, q_R\,;\, p_1, \ldots, p_R) \;=\; \sum_{i=1}^{R} \dot{q}_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \mathcal{L}\,,$$

definiert. Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (Satz von $2R$ Differentialgleichungen erster Ordnung) lauten

$$\dot{q}_i \equiv \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}\,, \qquad \dot{p}_i \equiv -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}\,, \quad i \in \{1, 2, \ldots, R\}\,.$$

1. Bohr-Sommerfeldsche Quantentheorie

1+1+2+1=5 Punkte

Die Annahme dieser Theorie ist, dass das betrachtete System den Gesetzen der klassischen Mechanik (siehe oben) gehorcht. Allerdings akzeptiert man von den möglichen Lösungen der klassischen Bewegungsgleichungen nur jene, die bestimmten Quantisierungsregeln genügen, was zu einem diskreten Energiespektrum führt. Die Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsregel für periodische Bewegungen mit R Freiheitsgraden lautet (h bezeichnet das Plancksche Wirkungsquantum):

$$\oint_{\mathcal{H}=E} p_i\, dq_i = n_i h\,, \qquad n_i \in \mathbb{N}\,, \quad i \in \{1, 2, \ldots, R\}\,.$$

Die Hamiltonfunktion eines Teilchens in einem Zentralpotential lautet

$$\mathcal{H}(r,\varphi;p_r,p_\varphi) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\varphi^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} = E \quad \text{mit} \quad E \leq 0 \quad \text{und} \quad e,m > 0 \tag{1}$$

unter der Annahme, dass sich das Teilchen in einer Ebene bewegt (elliptischer "Keplerorbit").

a) Welche sind die verallgemeinerten Koordinaten und Impulse in obigem System? Welche Koordinate ist zyklisch (Integral der Bewegung)? Was bedeutet dies für den zugehörigen Impuls?

b) Stellen Sie die Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsbedingungen für beide Koordinaten auf und berechnen Sie diese zunächst für die zyklische Koordinate.

c) Führen Sie nun die Integration auch für die verbliebene Koordinate explizit aus.

d) Welche möglichen Energieniveaus ergeben sich aus den Punkten **b)** und **c)** klassisch bzw. quantenmechanisch (im Sinne der Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsbedingung)?

Hinweis:

$$\int_{r_1}^{r_2} dr \sqrt{-1 - \frac{a^2}{r^2} + \frac{1}{r}} = \frac{\pi}{2}(1-2a) \quad \text{mit} \quad r_{1/2} = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{1-4a^2} \quad \text{falls} \quad 0 \leq a \leq \frac{1}{2}$$

2. Wiederholung: Lineare Algebra

2+2+1=5 Punkte

In der Quantenmechanik wird man sehr oft mit dem Problem der Diagonalisierung von Matrizen konfrontiert. Beispielsweise könnte eine stationäre Schrödingergleichung in einer diskreten Basis wir folgt aussehen

$$H\Psi_j = E_j \Psi_j \tag{2}$$

mit

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{3}$$

a) Ist die Matrix H hermitesch ($H^\dagger = H$) bzw. unitär ($H^\dagger H = \mathbb{1}$)? Welche Forderungen an die Eigenwerte (E_j, mit Beweis) und die Eigenbasis (Ψ_j, ohne Beweis) von H implizieren diese Eigenschaften?

b) Diagonalisieren Sie die Matrix H, d.h. berechnen Sie deren Eigenwerte und Eigenvektoren. Wie hoch ist der Entartungsgrad der jeweiligen Eigenwerte?

c) Weisen Sie die unter **a)** geforderten Eigenschaften an die Eigenbasis explizit nach.