Theoretische Physik 3 (Quantenmechanik)

Sommersemester 2019

Übungsblatt 1

Abgabe: 09.05.2019
Besprechung: 13.-17.05.2019

Aufgabe 1 .... *10 Punkte*

Berechnen Sie die (eindimensionale) Fouriertransformierte

$$\hat{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \mathrm{e}^{-ikx} f(x),$$

folgender Funktionen:

$$f(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right), \qquad \exp\left(-\gamma|x|\right), \qquad \theta(a-|x|), \qquad \frac{1}{x^2+b^2}, \qquad \frac{b^2}{(x^2+b^2)^2}$$

mit positiven Parametern $\sigma, \gamma, a, b > 0$ und der Stufenfunktion $\theta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x \geq 0 \end{cases}$.

Zeigen Sie (mittels partieller Integration), dass die Fouriertransformierte der Ableitung $\frac{df(x)}{dx}$ einfach durch $ik\hat{f}(k)$ gegeben ist.

Lösung: Mittels partieller Integration

$$\widehat{f'}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \; f'(x)\mathrm{e}^{-ikx} = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \; f(x)(-ik)\mathrm{e}^{-ikx} = ik\hat{f}(k).$$

1. Man löst die Differentialgleichung mittels partieller Integration

$$\frac{d\hat{f}(k)}{dk} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \; \underbrace{(-ix)\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}}_{=i\sigma^2\left[\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}\right]'} \mathrm{e}^{-ikx} = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \; i\sigma^2 \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}(-ik)\mathrm{e}^{-ikx} = -\sigma^2 k\hat{f}(k),$$

mit Anfangsbedingung

$$\hat{f}(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \; \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} = \frac{\sqrt{2}\sigma}{\sqrt{2\pi}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dy \; \mathrm{e}^{-y^2}}_{=\sqrt{\pi}} = \sigma.$$

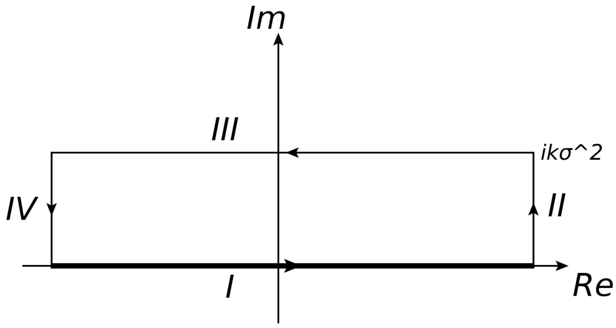
Die Lösung ist

$$\hat{f}(k) = \sigma \mathrm{e}^{-\frac{\sigma^2 k^2}{2}}.$$

Alternative Lösung:

$$\begin{aligned} \hat{f}(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \; e^{-\left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma}+\frac{ik\sigma}{\sqrt{2}}\right)^2} e^{-\frac{k^2\sigma^2}{2}} \qquad \Bigg| \text{Subst. } \frac{\tilde{x}}{\sqrt{2}\sigma} = \frac{x}{\sqrt{2}\sigma} + \frac{ik\sigma}{\sqrt{2}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{k^2\sigma^2}{2}} \int_{-\infty+ik\sigma^2}^{\infty+ik\sigma^2} d\tilde{x} \; e^{-\left(\frac{\tilde{x}}{\sqrt{2}\sigma}\right)^2} \end{aligned}$$

Beachte, dass die Integralgrenzen um einen imaginären Anteil verschoben wurden.
Für eine (endliche) reelle Verschiebung ist bekannt, dass man wieder $\int_{-\infty}^{\infty}$ erhält. Hier jedoch bedarf es eines weiteren Argumentes:



Der Cauchysche Integralsatz besagt, dass das Integral über den Weg I+II+III+IV=0 ist:

$$\int_{-x_0}^{x_0} ... + \int_{x_0}^{x_0+ik\sigma^2} ... + \int_{x_0+ik\sigma^2}^{-x_0+ik\sigma^2} ... + \int_{-x_0+ik\sigma^2}^{-x_0} ... = 0$$

Mit $x_0 \to \infty$ sehen wir, dass die Integrale II und IV gegen 0 gehen, da der Integrand bei konstanter Integrallänge selbst gegen 0 geht.Zurück bleibt

$$\int_{-\infty}^{\infty} ... + \int_{\infty+ik\sigma^2}^{-\infty+ik\sigma^2} ... = 0$$

und damit

$$\int_{-\infty}^{\infty} ... = \int_{-\infty+ik\sigma^2}^{\infty+ik\sigma^2} ...$$

Nun können wir mit der eigentlichen Rechnung weiter machen und erhalten

$$\begin{aligned} ... &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{k^2\sigma^2}{2}} \int_{-\infty+ik\sigma^2}^{\infty+ik\sigma^2} d\tilde{x}\ e^{-\left(\frac{\tilde{x}}{\sqrt{2}\sigma}\right)^2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{k^2\sigma^2}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{x}\ e^{-\left(\frac{\tilde{x}}{\sqrt{2}\sigma}\right)^2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{k^2\sigma^2}{2}} \sqrt{2\pi\sigma^2} \\ &= \sigma e^{-\frac{k^2\sigma^2}{2}} \end{aligned}$$

2.

$$\hat{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\int_{-\infty}^{0} dx\ \mathrm{e}^{-ikx+\gamma x} + \int_{0}^{\infty} dx\ \mathrm{e}^{-ikx-\gamma x} \right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{\gamma - ik} + \frac{1}{\gamma + ik} \right) = \frac{\gamma\sqrt{2/\pi}}{k^2+\gamma^2}.$$

Beachte, dass der Exponent komplexwertig ist. Das Integral kann formal trotzdem genauso ausgeführt werden, wie aus dem Reellen bekannt. Die mathematische Rechtfertigung ist wie folgt. Die Funktion ist integrabel,

$$\int_0^\infty dx\ \mathrm{e}^{-(\gamma+ik)x} \leq \int_0^\infty dx\ \left|\mathrm{e}^{-(\gamma+ik)x}\right| = \int_0^\infty dx\ \mathrm{e}^{-\gamma x} < \infty.$$

Des weiteren kann man durch Ableiten zeigen, dass $-\frac{1}{\alpha}\mathrm{e}^{-\alpha z}$ die Stammfunktion von $\mathrm{e}^{-\alpha z}$ ist, wobei $\alpha \in \mathbb{C}$ beliebig ist.

3.

$$\hat{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-a}^{a} dx\ \mathrm{e}^{-ikx} = \frac{-i}{k\sqrt{2\pi}} \left(\mathrm{e}^{ika} - \mathrm{e}^{-ika}\right) = \frac{2}{k\sqrt{2\pi}} \sin(ka).$$

4. In Beispiel 2 haben wir gezeigt, dass die inverse Fouriertransformierte

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\ \hat{f}(k) e^{ikx}$$

von $\hat{f}(k) = \frac{1}{k^2+b^2}$ sich zu $f(x) = \frac{\sqrt{\pi/2}}{b} e^{-b|x|}$ berechnet . Daher

$$\hat{f}(k) = \frac{\sqrt{\pi/2}}{b} e^{-b|k|}.$$

Eine *Alternativlösung* verwendet den Residuensatz. Der Integrand

$$\frac{e^{-ikx}}{(x+ib)(x-ib)}$$

hat einfache Polstellen bei ib und $-ib$. Für $k<0$ wählt man den Weg in der oberen Halbebene (siehe Abbildung 1(a)), so dass $e^{-ikz} = e^{-|k|y} e^{-ikx}$ für große y gegen Null geht und damit nur noch das Integral entlang der x-Achse beiträgt. Nach dem Residuensatz, trägt nur das Residuum ib bei:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \frac{e^{-ikx}}{(x+ib)(x-ib)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \oint dz\ \frac{e^{-ikz}}{(z+ib)(z-ib)} = 2\pi i \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{kb}}{2ib} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{e^{-|k|b}}{b}.$$

Für $k>0$, wählt man den Weg in der unteren Halbebene (Abbildung 1(b)) und muss beachten, dass man nun von ∞ nach $-\infty$ integriert, also

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \frac{e^{-ikx}}{(x+ib)(x-ib)} = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \oint dz\ \frac{e^{-ikz}}{(z+ib)(z-ib)} = -2\pi i \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-kb}}{-2ib} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{e^{-|k|b}}{b}.$$

5. Wenn man Beispiel 4 nach b ableitet, erhält man

$$\frac{d}{db} \frac{1}{x^2+b^2} = -\frac{2b^2}{(x^2+b^2)^2}.$$

Daraus ergibt sich die Fouriertranformierte

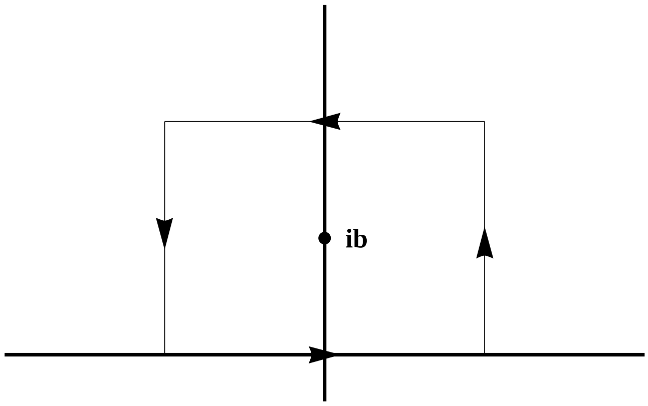
$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \frac{b^2 e^{-ikx}}{(x^2+b^2)^2} = -\frac{1}{2} \frac{d}{db} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \frac{e^{-ikx}}{x^2+b^2} = -\frac{1}{2} \frac{d}{db} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{e^{-|k|b}}{b} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{e^{-|k|b}}{2b} (1+|k|b).$$

Alternativ kann man wieder den Residuensatz verwenden. Der Integrand hat Polstellen 2. Ordnung bei ib und $-ib$. Analog zu 4. berechnen wir für $k<0$:

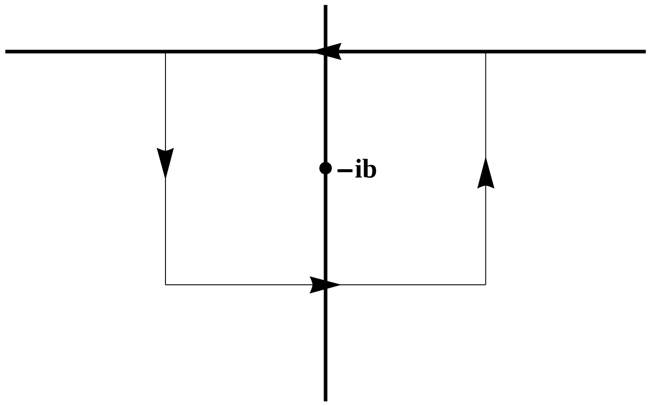
$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \frac{b^2 e^{-ikx}}{(x+ib)^2(x-ib)^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \oint dz\ \frac{b^2 e^{-ikz}}{(z+ib)^2(z-ib)^2} &= 2\pi i \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{kb}}{4ib} (1-kb) \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{e^{-|k|b}}{2b} (1+|k|b). \end{aligned}$$

Für $k>0$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \frac{b^2 e^{-ikx}}{(x+ib)^2(x-ib)^2} = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \oint dz\ \frac{b^2 e^{-ikz}}{(z+ib)^2(z-ib)^2} &= -2\pi i \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-kb}}{-4ib} (1+kb) \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{e^{-|k|b}}{2b} (1+|k|b). \end{aligned}$$



(a) Integralweg (obere Halbebene).



(b) Integralweg (untere Halbebene).

Abbildung 1: Integrationswege im Komplexen für den Residuensatz.

Aufgabe 2 .... *10 Punkte*

Betrachten Sie ein quantenmechanisches Teilchen, das durch folgende normierte(?) Wellenfunktion beschrieben wird:

$$\psi(x) = \begin{cases} 2\alpha^{3/2}\, x\, e^{-\alpha x} & x \geq 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

An welcher Stelle x_0 nimmt die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x) = |\psi(x)|^2$ ihren Maximalwert an? Berechnen Sie die Erwartungswerte $\langle x \rangle$ und $\langle x^2 \rangle$. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit das Teilchen im Bereich zwischen $x = 0$ und $x = 1/\alpha$ zu finden? Berechnen Sie die Fouriertransformierte

$$\phi(p) := \hat{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \mathrm{e}^{-ipx/\hbar} \psi(x)$$

und benutzen Sie dieses Ergebnis um die Erwartungswerte $\langle p \rangle$ und $\langle p^2 \rangle$ zu berechnen.

Lösung: Die Wellenfunktion ist normiert:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 4\alpha^3 \int_0^{\infty} dx\ x^2 \mathrm{e}^{-2\alpha x} \overset{y=2\alpha x}{=} \frac{4\alpha^3}{(2\alpha)^3} \int_0^{\infty} dy\ y^2 \mathrm{e}^{-y} = 1.$$

Das Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x) = 4\alpha^3 x^2 \mathrm{e}^{-2\alpha x}$ berechnet sich durch

$$\rho'(x_0) = 4\alpha^3 \mathrm{e}^{-2\alpha x_0}(2x_0 - 2\alpha x_0^2) = 0,$$

also $x_0 = \frac{1}{\alpha}$. Die Erwartungswerte sind

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x |\psi(x)|^2 = 4\alpha^3 \int_0^{\infty} dx\ x^3 \mathrm{e}^{-2\alpha x} \overset{y=2\alpha x}{=} \frac{4\alpha^3}{(2\alpha)^4} \int_0^{\infty} dy\ y^3 \mathrm{e}^{-y} = \frac{3}{2\alpha},$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x^2 |\psi(x)|^2 = \frac{4\alpha^3}{(2\alpha)^5} \int_0^{\infty} dy\ y^4 \mathrm{e}^{-y} = \frac{3}{\alpha^2}.$$

Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Intervall $[0, 1/\alpha]$ zu finden ist

$$P = \int_0^{1/\alpha} dx\ |\psi(x)|^2 = 4\alpha^3 \int_0^{1/\alpha} dx\ x^2 \mathrm{e}^{-2\alpha x} = \frac{1}{2} \int_0^2 dy\ y^2 \mathrm{e}^{-y} =$$

$$= -\left(1 + y + \tfrac{y^2}{2}\right) \mathrm{e}^{-y} \Big|_0^2 = 1 - \tfrac{5}{e^2} = 0.323.$$

Die Fouriertransformierte ist

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \mathrm{e}^{-ipx/\hbar} \psi(x) = \frac{2\alpha^{3/2}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{\infty} dx\ x \mathrm{e}^{-(\alpha + ip/\hbar)x} =$$

$$= \frac{2\alpha^{3/2}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{-1 - (\alpha + ip/\hbar)x}{(\alpha + ip/\hbar)^2} \mathrm{e}^{-(\alpha + ip/\hbar)x} \Big|_0^{\infty} = \sqrt{\frac{2\alpha^3}{\pi\hbar}} \frac{1}{(\alpha + ip/\hbar)^2},$$

wobei das komplexe Integral wieder analog zu oben behandelt werden kann. Die Erwartungswerte sind

$$\begin{aligned}\langle p\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dp\; p|\phi(p)|^2 = \frac{2\alpha^3}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{p}{(\alpha^2+p^2/\hbar^2)^2} = 0,\\ \langle p^2\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dp\; p^2|\phi(p)|^2 = \frac{2\alpha^3}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{p^2}{(\alpha^2+p^2/\hbar^2)^2} \overset{p=\hbar\alpha\tan\theta}{=}\\ &= \frac{4\alpha^3}{\pi\hbar}\cdot\frac{\hbar^3\alpha^3}{\alpha^4}\underbrace{\int_0^{\pi/2} d\theta\; (\cos\theta)^{-2-2+4}\sin^2\theta}_{=\pi/4} = \hbar^2\alpha^2.\end{aligned}$$

Aufgabe 3 .... *5 Punkte*

Zeigen Sie, dass der Erwartungswert des Orts $\langle x\rangle$ mittels der Wellenfunktion $\phi(p)$ im Impulsraum folgendermaßen berechnet werden kann:

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp\,\phi^*(p) i\hbar\partial_p\phi(p),$$

wobei $\partial_p := \frac{\partial}{\partial p}$. Berechnen Sie (in der Impulsraum-Darstellung) den Kommutator von Orts- und Impulsoperator $[\hat{x},\hat{p}]$.

Lösung:

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\; x\psi^*(x)\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\;\psi(x)\frac{x}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} dp\;\phi^*(p)\mathrm{e}^{-ipx/\hbar} =\\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp\;\phi^*(p)\,(i\hbar\partial_p)\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\psi(x)\mathrm{e}^{-ipx/\hbar}}_{=\hat{\psi}(p)} = \int_{-\infty}^{\infty} dp\;\phi^*(p) i\hbar\partial_p\phi(p).\end{aligned}$$

In Impulsraumdarstellung gilt also $\hat{x} = i\hbar\partial_p$ (wobei $\hat{x}$ den Ortsoperator bezeichnet, nicht die Fouriertransformierte!). Dann

$$[\hat{x},\hat{p}]f(p) = (\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x})f(p) = i\hbar\Big(\partial_p(pf(p) - p\partial_p f(p)\Big) = i\hbar f(p),$$

also gilt $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar\,\mathrm{Id}$, wobei Id den Einheitsoperator im Hilbertraum bezeichnet.

Aufgabe 4 .... *5 Punkte*

Bestimmen Sie für eine Wellenfunktion der Form:

$$\psi(x) = A\,e^{-\mu|x|}\,,$$

den Normierungskoeffizienten A. Berechnen Sie die zugehörige Wellenfunktion $\phi(p)$ im Impulsraum. Welchen Wert hat das Unschärfeprodukt $\Delta x\cdot\Delta p$? Die Orts- und Impulsunschärfen $\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}$ und $\Delta p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2}$ sind als die Quadratwurzel aus den mittleren quadratischen Abweichungen definiert.

Lösung: Der Normierungskoeffizient berechnet sich über

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\;|\psi(x)|^2 = 2A^2\int_0^{\infty} dx\;\mathrm{e}^{-2\mu x} = \frac{A^2}{\mu}\int_0^{\infty} dy\;\mathrm{e}^{-y} = \frac{A^2}{\mu}.$$

Die Fouriertransformierte berechnet sich analog zu Aufgabe 1:

$$\phi(p) = \frac{\sqrt{\mu}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \mathrm{e}^{-ipx/\hbar} \mathrm{e}^{-\mu|x|} = \frac{\mu^{3/2}\sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}}}{(p/\hbar)^2 + \mu^2}.$$

Damit:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\; x|\psi(x)|^2 = \mu \int_{-\infty}^{\infty} dx\; x\mathrm{e}^{-2\mu|x|} = 0,$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\; x^2|\psi(x)|^2 \overset{y=2\mu x}{=} 2\frac{\mu}{(2\mu)^3} \underbrace{\int_0^{\infty} dy\; y^2\mathrm{e}^{-y}}_{=2} = \frac{1}{2\mu^2},$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp\; p|\phi(p)|^2 = \frac{2\mu^3}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp\; \frac{p}{\Big((p/\hbar)^2 + \mu^2\Big)^2} = 0,$$

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp\; p^2|\phi(p)|^2 = 2\frac{2\mu^3}{\pi\hbar} \int_0^{\infty} dp\; \frac{p^2}{\Big((p/\hbar)^2 + \mu^2\Big)^2} \overset{k=p/\hbar}{=} \frac{4\hbar^3\mu^3}{\pi\hbar} \underbrace{\int_0^{\infty} dk\; \frac{k^2}{(k^2+\mu^2)^2}}_{=\frac{\pi}{4\mu}} = \hbar^2\mu^2.$$

Folglich:

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{1}{\sqrt{2}\mu} \cdot \hbar\mu = \sqrt{2}\frac{\hbar}{2}.$$

Aufgabe 5 .... *10 Punkte*

Bohr-Sommerfeld-Quantisierung des Wasserstoffatoms: In ebenen Polarkoordinaten lautet die Lagrangefunktion für ein Elektron der Masse m im Coulombfeld eines Protons

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) + \frac{\alpha\hbar c}{r}\,.$$

Bestimmen Sie die kanonisch konjugierten Impulse p_r und p_ϕ sowie die Hamiltonfunktion H, wobei $H = E < 0$ für gebundene Bahnen gilt. Berechnen Sie den maximalen und minimalen Radius $r_\pm$ und zeigen Sie, dass die beiden Quantisierungsbedingungen

$$\oint d\phi\, p_\phi = n_\phi h\,, \qquad \oint dr\, p_r = n_r h\,, \qquad n_\phi, n_r \in \mathbb{N}\,,$$

auf die bekannte Spektralformel $E_n = -mc^2\alpha^2/2n^2$ mit $n = n_r + n_\phi$ führen.Benutzen Sie das Integral $\int_a^b dx\, x^{-1}\sqrt{(x-a)(b-x)} = \pi[(a+b)/2 - \sqrt{ab}]$, wobei $0 < a < b$ sein soll.

Lösung: Die kanonisch konjugierten Impulse sind

$$p_\phi = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}} = mr^2\dot{\phi} = \text{const.}, \quad \text{da } \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi} = 0$$

$$p_r = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{r}} = m\dot{r}.$$

Die Hamiltonfunktion ergibt sich aus der Lagrangefunktion durch

$$H = \dot{r}p_r + \dot{\phi}p_\phi - \mathcal{L} = \frac{m}{2}\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2\right) - \frac{\alpha\hbar c}{r}$$

$$= \frac{m}{2}\left(\frac{p_r^2}{m^2} + \frac{p_\phi^2}{m^2r^2}\right) - \frac{\alpha\hbar c}{r} = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2}\right) - \frac{\alpha\hbar c}{r}$$

Aus der ersten Quantisierungsbedingung erhält man

$$\oint d\phi p_\phi = \int_0^{2\pi} d\phi \underbrace{p_\phi}_{\text{const}} = 2\pi p_\phi = n_\phi h \qquad \Rightarrow p_\phi = n_\phi \hbar$$

$$0 > E = H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{n_\phi^2\hbar^2}{r^2}\right) - \frac{\alpha\hbar c}{r}$$

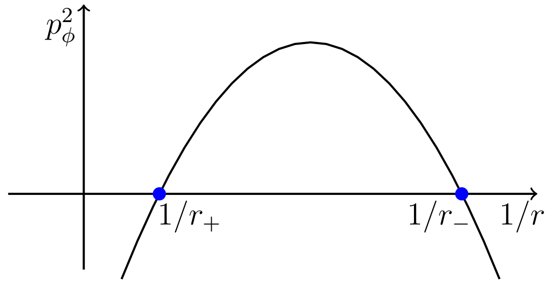
und somit

$$p_r^2(r) = 2m\left(E + \frac{\alpha\hbar c}{r} - \frac{n_\phi^2\hbar^2}{2mr^2}\right). \tag{1}$$

Damit ist die Bestimmungsgleichung für $r_\pm$

$$0 \stackrel{!}{=} \dot{r} = \frac{p_r}{m}$$

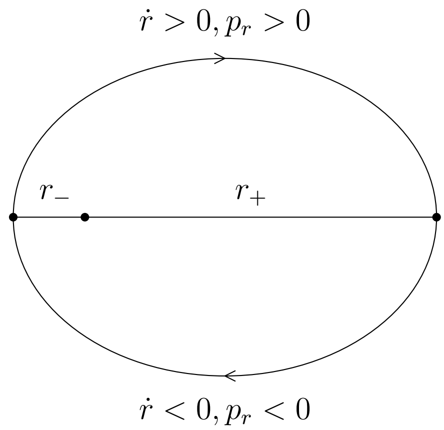
$$\Rightarrow r^2 + \underbrace{\frac{\alpha\hbar c}{E}}_{<0} - \underbrace{\frac{n_\phi^2\hbar^2}{2mE}}_{>0} = 0. \tag{2}$$



Und der maximale und minimale Radius ergeben sich zu

$$r_\pm = \frac{\alpha\hbar c}{2|E|} \pm \sqrt{\left(\frac{\alpha\hbar c}{2E}\right)^2 - \frac{n_\phi^2\hbar^2}{2m|E|}} = \frac{\alpha\hbar c}{2|E|}\left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{2|E|n_\phi^2}{m\alpha^2c^2}}\right).$$

Das Elektron befindet sich auf einer Ellipsenbahn. Aus der zweiten Quantisierungsbedingung und Gl.(1) erhalten wir



$$\oint drp_r = 2\int_{r_-}^{r_+} drp_r = n_r h$$

$$n_r h = 2\int_{r_-}^{r_+} dr\sqrt{2m|E|\frac{1}{r^2}\left(-r^2 - \frac{\alpha\hbar c}{|E|} + \frac{n_\phi^2\hbar^2}{2m|E|}\right)}$$

$$= 2\int_{r_-}^{r_+} dr\sqrt{2m|E|}\frac{1}{r}\sqrt{(r-r_-)(r_+-r)}$$

$$\stackrel{\text{Hinweis}}{=} 2\sqrt{2m|E|}\pi\left(\frac{r_+ + r_-}{2} - \sqrt{r_+r_-}\right).$$

Mit dem Satz von Vieta und Gl.(2) erhält man

$$n_r h = 2\pi\sqrt{2m|E|}\left(\frac{\alpha\hbar c}{2|E|} - \frac{n_\phi\hbar}{\sqrt{2mE}}\right)$$

und somit

$$n_r\hbar = \alpha\hbar c\sqrt{\frac{m}{2|E|}} - \hbar n_\phi$$

$$\alpha c\sqrt{\frac{m}{2|E|}} = n_r + n_\phi = n.$$

Daraus ergibt sich die bekannte Spektralformel des H-Atoms

$$\boxed{E_n = -\frac{m\alpha^2c^2}{2n^2}.}$$