Lösungsvorschlag Theoretische Physik D
Übungsblatt 3

Prof. Dr. G. Schön und Dr. A. Posazhennikova

Sommersemester 2007

Aufgabe 1 **2 Punkte**

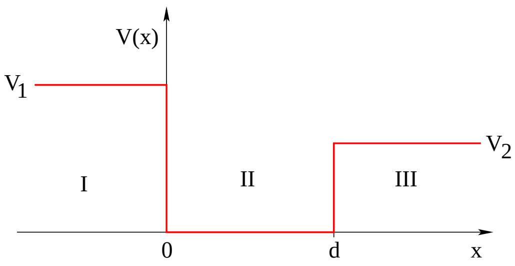

Abbildung 1: Potentialtopf mit Wänden verschiedener Höhe.

Knotensatz: Wenn das Spektrum eines eindimensionalen Systems diskret ist, besitzt die Wellenfunktion $\Psi_n(x)$ genau n Knoten. Wir betrachten für das diskrete Spektrum nur Teilchen die im Potentialtopf gefangen sind.

Wir variieren V_2, von $V_2 = 0$ beginnend, bis der erste gebundene Zustand im Potentialtopf erscheint. Das minimale V_2 ergibt sich wenn die Energie des gebundenen Zustands gerade $E = V_2$ ist. Wir können die Schrödingergleichung sofort für $E = V_2$ lösen. Da es der niedrigste gebundene Zustand ist, besitzt die Wellenfunktion dieses Niveaus keine Knoten (siehe Knotensatz). Die Lösungen in den Teilbreichen sind:

$$\Psi_I(x) = Ae^{\rho_1 x}, \qquad x < 0, \qquad (\rho_1 = \sqrt{2m(V_1 - V_2)/\hbar^2}), \tag{1}$$
$$\Psi_{II}(x) = B_1 \cos(\rho_2 x + B_2), \qquad 0 < x < d, \qquad (\rho_2 = \sqrt{2mV_2/\hbar^2}), \tag{2}$$
$$\Psi_{III}(x) = C, \qquad x > a \tag{3}$$

(Für $x > a$ die Lösung ist im Prinzip von der Form $Ce^{-\rho_3}x$, jedoch $\rho_3 = 0$ für $E = V_2$).

Die Randbedingung sind (Stetigkeit von Ψ und Ψ' bei $x = 0$ und $x = d$):

$$\Psi(0+) = \Psi(0-), \tag{4}$$
$$\Psi(d+) = \Psi(d-), \tag{5}$$
$$\Psi'(0+) = \Psi'(0-) \tag{6}$$
$$\Psi'(d+) = \Psi'(d-). \qquad \Rightarrow \tag{7}$$

$$A = B_1 \cos(B_2), \qquad B_1 \cos(\rho_2 d + B_2) = C \tag{8}$$
$$A\rho_1 = -B_1\rho_2 \sin(B_2), \qquad -B_1\rho_2 \sin(\rho_2 + B_2) = 0 \qquad \Rightarrow \tag{9}$$

$$\tan(B_2) = -\frac{\rho_1}{\rho_2}; \qquad B_2 = -\rho_2 d. \qquad \Rightarrow \tag{10}$$

Wir bekommen die Bedingung

$$\boxed{\tan(\rho_2 d) = \frac{\rho_1}{\rho_2}}. \tag{11}$$

Also ergibt sich das minimale $\rho_2 d$ (wenn das erste Niveau im Potentialtopf erscheint), als $\arctan \frac{\rho_1}{\rho_2}$. Wenn $\rho_2 d$ grösser als dieser Wert ist, dann können weitere Niveaus im Topf erscheinen, das Spektrum hat dann immer einen diskreten Anteil. Die gesuchte Beziehung ist also die Ungleichung

$$\sqrt{2mV_2 d^2/\hbar^2} \geq \arctan\left(\sqrt{\frac{V_1 - V_2}{V_2}}\right). \tag{12}$$

Aufgabe 2 $\boxed{\textbf{2 Punkte}}$

a.)

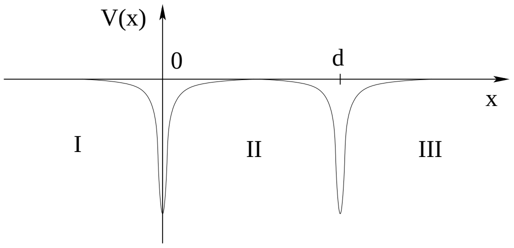

Abbildung 2: Potenzialtopf aus zwei delta-Funktionen.

Die Schrödinger-Gleichung für das Potenzial (Abb. 2) lautet:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - c\delta(x) - c\delta(x-d)\right]\Psi(x) = E\Psi(x). \tag{13}$$

Aus (13) bekommen wir

$$\begin{aligned}
\Psi_I(x) &= Ae^{\rho x}; \quad x < 0, \\
\Psi_{II}(x) &= B_1 e^{\rho x} + B_2 e^{-\rho x}; \quad 0 < x < d, \\
\Psi_{III}(x) &= Ce^{-\rho(x-d)}; \quad x > d,
\end{aligned} \tag{14}$$

wobei $\rho = \sqrt{-2mE}/\hbar^2$ ist und $E < 0$. (Ψ_{III} kann auch als $Ce^{\rho x}$ gewählt werden, aber die Form (14) ist einfach bequemer.)

Randbedingungen:

$$\Psi(0+) = \Psi(0-) \tag{15}$$

$$\Psi'(0+) - \Psi'(0-) = -\frac{2mc}{\hbar^2}\Psi(0) \tag{16}$$

$$\Psi(d+) = \Psi(d-) \tag{17}$$

$$\Psi'(d+) - \Psi'(d-) = -\frac{2mc}{\hbar^2}\Psi(d) \tag{18}$$

Also

$$(15) \quad \Rightarrow \quad A = B_1 + B_2 \tag{19}$$

$$(16) \quad \Rightarrow \quad \rho B_1 - \rho B_2 - \rho A = -\frac{2mc}{\hbar^2}A \quad \Rightarrow \tag{20}$$

$$B_1 = \left(-1 + \frac{\rho\hbar^2}{mc}\right)B_2, \tag{21}$$

dann

$$(17) \quad \Rightarrow \quad C = B_1 e^{\rho d} + B_2 e^{-\rho d} \tag{22}$$

$$(18) \quad \Rightarrow \quad -\rho C - \rho B_1 e^{\rho d} + \rho B_2 e^{-\rho d} = -\frac{2mc}{\hbar^2}C \quad \Rightarrow \tag{23}$$

$$C = \frac{2B_2 e^{-\rho d}}{-\frac{2mc}{\rho\hbar^2} + 2} = \frac{B_2 e^{-\rho d}}{-\frac{mc}{\rho\hbar^2} + 1} = [\text{siehe} \quad (22)] = B_1 e^{\rho d} + B_2 e^{-\rho d} \quad \Rightarrow \tag{24}$$

$$B_1 = B_2 e^{-2\rho d}\left(\frac{1}{-\frac{mc}{\rho\hbar^2} + 1} - 1\right) \tag{25}$$

Aus (21) und (25) bekommen wir

$$e^{-2\rho d}\left(\frac{1}{-\frac{mc}{\rho\hbar^2}+1}-1\right) = \left(-1+\frac{\rho\hbar^2}{mc}\right) \quad \Rightarrow \tag{26}$$

$$e^{-2\rho d} = \left(1-\frac{\rho\hbar^2}{mc}\right)^2, \tag{27}$$

und schließlich:

$$\boxed{e^{-\rho d} = \pm\left(1-\frac{\rho\hbar^2}{mc}\right)}. \tag{28}$$

1 Punkte

b.)

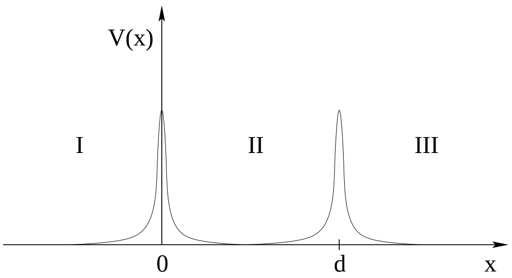

Abbildung 3: Potenzialbarriere aus zwei delta-Funktion.

Die Schrödingergleichung für das Potenzial (Abb. 3) lautet:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+c\delta(x)+c\delta(x-d)\right]\Psi(x) = E\Psi(x). \tag{29}$$

Das Teilchen bewegt sich von links nach rechts. Aus (29) bekommen wir

$$\begin{aligned}
\Psi_I(x) &= e^{i\rho x}; \quad x<0, \\
\Psi_{II}(x) &= B_1 e^{i\rho x}+B_2 e^{-i\rho x}; \quad 0<x<d, \\
\Psi_{III}(x) &= Ce^{i\rho(x-d)}; \quad x>d,
\end{aligned} \tag{30}$$

wobei $\rho = \sqrt{2mE}/\hbar^2 > 0$ ist. (Wieder: Ψ_{III} kann auch als $Ce^{i\rho x}$ gewählt werden, aber die Form (30) ist bequemer.) Es gibt kein reflektiertes Teilchen im Bereich I wegen der Bedingung $R=0$ in dieser Aufgabe.

Randbedingungen:

$$\Psi(0+) = \Psi(0-) \tag{31}$$

$$\Psi'(0+)-\Psi'(0-) = \frac{2mc}{\hbar^2}\Psi(0) \tag{32}$$

$$\Psi(d+) = \Psi(d-) \tag{33}$$

$$\Psi'(d+)-\Psi'(d-) = \frac{2mc}{\hbar^2}\Psi(d) \tag{34}$$

Wir bekommen aus (31), dass $1 = B_1+B_2$.

Aus (32) folgt

$$i\rho B_1 - i\rho B_2 - i\rho = \frac{2mc}{\hbar^2} \quad \Rightarrow$$

$$B_1 - B_2 = \frac{-2imc}{\rho\hbar^2}+1 \quad \Rightarrow$$

$$\boxed{B_1 = -\frac{imc}{\rho\hbar^2}+1}; \quad \boxed{B_2 = \frac{imc}{\rho\hbar^2}}.$$

$\Psi_{II}(x)$ ist dann:

$$\Psi_{II}(x) = \cos(\rho x) + \sin(\rho x)\left(i + \frac{2mc}{\rho\hbar^2}\right). \tag{35}$$

Aus (33) bekommen wir

$$\cos(\rho d) + \sin(\rho d)\left(i + \frac{2mc}{\rho\hbar^2}\right) = C \tag{36}$$

Und aus (34) haben wir

$$i\rho C + \rho\sin(\rho d) - \rho\cos(\rho d)\left(i + \frac{2mc}{\rho\hbar^2}\right) = \frac{2mc}{\hbar^2}C \tag{37}$$

Wir erhalten die Bedingung für $\tan(\rho d)$ wie folgt:

$$\cos(\rho d) + \sin(\rho d)\left(i + \frac{2mc}{\rho\hbar^2}\right) = \frac{\sin(\rho d) - \cos(\rho d)\left(i + \frac{2mc}{\rho\hbar^2}\right)}{\frac{2mc}{\rho\hbar^2} - i} \quad \Rightarrow \tag{38}$$

$$\boxed{\tan(\rho d) = -\frac{\rho\hbar^2}{mc}} \tag{39}$$

Diese Bedingung (39) bestimmt die Energien $E = \hbar^2\rho^2/(2m)$, bei denen die Reflexionsamplitude des Teilchens von der δ-Doppelbarriere verschwindet.

1 Punkt

Aufgabe 3 $\boxed{\textbf{2 Punkte}}$

Hermite'sche Polynome

a.)

$$\begin{aligned}
e^{-(z-t)^2} &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}\left[\frac{d^n}{dt^n}e^{-(z-t)^2}\right]_{t=0} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}\left[\left(-\frac{d}{dz}\right)^n e^{-(z-t)^2}\right]_{t=0} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}(-1)^n\frac{d^n}{dz^n}e^{-z^2} \qquad \Rightarrow \\
e^{-t^2+2zt} &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}(-1)^n e^{z^2}\frac{d^n}{dz^n}e^{-z^2} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}H_n(z).
\end{aligned} \tag{40}$$

b.)

Die erzeugende Funktion für Hermite'sche Polynome ist:

$$F(z,t) = e^{-t^2+2tz} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}H_n(z) \tag{41}$$

Schritt 1: wir differenzieren $F(z,t)$ nach z

$$\frac{dF(z,t)}{dz} = 2te^{-t^2+2tz} = 2t\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}H_n(z) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}\frac{d}{dz}H_n(z) \qquad \Rightarrow$$

$$2t\left[H_0(z) + tH_1(z) + \frac{t^2}{2}H_2(z) + ...\right] =$$

$$\frac{d}{dz}H_0(z) + t\frac{d}{dz}H_1(z) + \frac{t^2}{2}\frac{d}{dz}H_2(z) + ...$$

Nun vergleichen wir die Koeffizienten:

$$
\begin{aligned}
t^0 &: \quad \frac{d}{dz}H_0(z) = 0 \\
t^1 &: \quad \frac{d}{dz}H_1(z) = 2H_0(z) \\
t^2 &: \quad \frac{1}{2}\frac{d}{dz}H_2(z) = 2H_1(z) \\
t^3 &: \quad \frac{1}{6}\frac{d}{dz}H_3(z) = H_2(z) \\
t^4 &: \quad ... \quad \Rightarrow
\end{aligned}
$$

wir bekommen jetzt die **Rekursionsbeziehung 1**:

$$\boxed{\frac{d}{dz}H_n(z) = 2nH_{n-1}(z)} \tag{42}$$

Schritt 2: wir differenzieren $F(z,t)$ nach t

$$
\begin{aligned}
\frac{dF(z,t)}{dt} = (-2t+2z)e^{-t^2+2tz} = (-2t+2z)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}H_n(z) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{nt^{n-1}}{n!}H_n(z) \quad \Rightarrow \\
(-2t+2z)\left[H_0(z) + tH_1(z) + \frac{t^2}{2}H_2(z) + \frac{t^3}{6}H_3(z) + ...\right] = \\
t^{-1}H_0(z) + H_1(z) + tH_2(z) + \frac{1}{2}t^2H_3(z) + ... \quad \Rightarrow
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
t^0 &: \quad H_1(z) = 2zH_0(z) \\
t^1 &: \quad H_2(z) = -2H_0(z) + 2zH_1(z) \\
t^2 &: \quad \frac{1}{2}H_3(z) = -2H_1(z) + zH_2(z) \\
t^3 &: \quad ... \quad \Rightarrow
\end{aligned}
$$

Rekursionsbeziehung 2

$$\boxed{H_n(z) = 2zH_{n-1}(z) - 2(n-1)H_{n-2}(z)} \tag{43}$$

Betrachten wir nun die rechte Seite der Differenzialgleichung

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} - 2z\frac{d}{dz} + 2n\right]H_n(z) = 0 \tag{44}$$

Mit Hilfe der Rekursionsbeziehung 1 bekommen wir

$$\frac{d^2}{dz^2}H_n(z) = 2n2(n-1)H_{n-2}(z) \quad \Rightarrow$$

$$R.S. = 4n(n-1)H_{n-2}(z) - 4nzH_{n-1}(z) + 2nH_n(z) = 2n\left[H_n(z) - 2zH_{n-1}(z) + 2(n-1)H_{n-2}(z)\right] \tag{45}$$

Das ist aber null wegen Beziehung 2.

1 Punkt

c.)

Orthogonalitätsbedingung

Schritt 1: Wir beweisen, dass, wenn $m \neq n$ ist, das Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2}H_n(x)H_m(x) \tag{46}$$

gleich null ist.

$$\int dz e^{-z^2} H_m \left[\frac{d^2}{dz^2} - 2z\frac{d}{dz}\right] H_n = 2n \int dz e^{-z^2} H_m H_n(z) \tag{47}$$
$$\int dz e^{-z^2} H_n \left[\frac{d^2}{dz^2} - 2z\frac{d}{dz}\right] H_m = 2m \int dz e^{-z^2} H_m H_n(z) \tag{48}$$

Wir betrachten nun das erste Integral auf der linken Seite von Gl. (47):

$$\begin{aligned} I &= \int dz e^{-z^2} H_m \frac{d^2}{dz^2} H_n = \\ &= e^{-z^2} H_m \frac{dH_n}{dz}\Big|_{-\infty}^{\infty} + \int dz 2z e^{-z^2} H_m \frac{dH_n}{dz} - \int dz e^{-z^2} \frac{dH_m}{dz}\frac{dH_n}{dz} = \\ &= e^{-z^2} H_m \frac{dH_n}{dz}\Big|_{-\infty}^{\infty} + \int dz 2z e^{-z^2} H_m \frac{dH_n}{dz} - e^{-z^2} H_n \frac{dH_m}{dz}\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int dz\, 2z e^{-z^2} H_n \frac{dH_m}{dz} - \int dz e^{-z^2} H_n \frac{d^2 H_m}{dz^2} \end{aligned} \tag{49}$$

Der erste und dritte Term in dieser Gl. sind gleich null, weil die Exponentialfunktion e^{z^2} schneller als jede Potenz divergiert. Der zweite Term hebt sich gegen den 2. Term auf der linke Seite von (47) weg, und wir erhalten:

$$\int dz e^{-z^2} H_m \left[\frac{d^2}{dz^2} - 2z\frac{d}{dz}\right] H_n = \int dz e^{-z^2} H_n \left[\frac{d^2}{dz^2} - 2z\frac{d}{dz}\right] H_m. \tag{50}$$

Nun verwenden wir Gl. (48) und bekommen:

$$(2n - 2m) \int dz e^{-z^2} H_m H_n = 0 \tag{51}$$

D.h., wir erhalten für $n \neq m$

$$\int dz e^{-z^2} H_m H_n = 0. \tag{52}$$

d.)

Fall $n = m$.

1) $n = 0 \quad \Rightarrow$

$$\int dz e^{-z^2} H_n H_n = \int dz e^{-z^2} = [\text{Übungsblatt 1}] = \sqrt{\pi}. \tag{53}$$

2) $n = 1 \quad \Rightarrow$

$$\int dz e^{-z^2} H_n H_n = 4 \int dz z^2 e^{-z^2} = 2\sqrt{\pi}. \tag{54}$$

3) Wir nehmen an, dass für $n = k$ die Beziehung $\int dz e^{-z^2} H_k H_k = 2^k k! \sqrt{\pi}$ gilt. Für $n = k+1$ erhalten wir dann aus der 2. Rekursionsbeziehung

$$H_{k+1} = 2zH_k - 2kH_{k-1} \quad \Rightarrow \tag{55}$$

$$\begin{aligned} \int dz e^{-z^2} H_{k+1} H_{k+1} &= \int dz e^{-z^2} 2z H_{k+1} H_k - \int dz e^{-z^2} 2k H_{k+1} H_{k-1} = \int dz e^{-z^2} 2z H_{k+1} H_k = \\ -\int dz \left(\frac{d}{dz} e^{-z^2}\right) H_k H_{k+1} &= -e^{-z^2} H_k H_{k+1}\Big|_{-\infty}^{\infty} + \int dz e^{-z^2} \left(H_k \frac{dH_{k+1}}{dz} + H_{k+1}\frac{dH_k}{dz}\right) \\ &= \int dz e^{-z^2} H_k (2(k+1)) H_k \quad \Rightarrow \end{aligned} \tag{56}$$

$$\int dz e^{-z^2} H_{k+1} H_{k+1} = 2(k+1) \int dz e^{-z^2} H_k H_k \tag{57}$$

Wegen der Induktionsannahme ist $\int dz e^{-z^2} H_k H_k = 2^k k! \sqrt{\pi}$. Also folgt: $\int dz e^{-z^2} H_{k+1} H_{k+1} = 2^{k+1}(k+1)! \sqrt{\pi}$, was zu beweisen war.

1 Punkt