Übungen zur Modernen Theoretischen Physik I SS 14

Prof. Dr. Gerd Schön
Andreas Heimes, Dr. Andreas Poenicke

Lösungen zu Blatt 3
Besprechung 14.05.2014

1. Teilchen im Zylinder (3 Punkte)

Die Schrödinger-Gleichung in Zylinderkoordinaten lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\partial_r\left(r\partial_r\psi\right)+\frac{1}{r^2}\partial_\phi^2\psi+\partial_z^2\psi\right]+V(r)\psi=E\psi$$

Mit dem Ansatz $\psi(r,\varphi,z)=A\exp(in\varphi)\sin(k_z z)R(r)$ erhalten wir

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\partial_r\left(r\partial_r R\right)-\frac{n^2}{r^2}R-k_z^2R\right]+V(r)R=ER$$

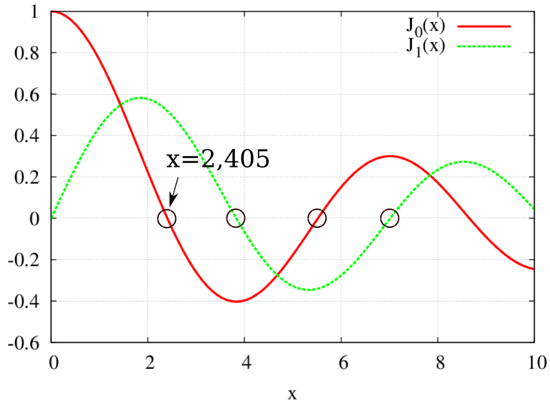

Abbildung 1: Nullstellen der Besselfunktionen.

(a) Die Eindeutigkeit der Wellenfunktion verlangt, dass

$$\psi(r,0,z)=\psi(r,2\pi,z)$$

und damit $\exp(i2\pi n)=1$. Dementsprechend muss n eine ganze Zahl sein. Desweiteren muss die Wellenfunktion am Ende des Zylinders verschwinden, also $\sin(k_zL)=0$ gelten. Damit ist $k_z=\frac{\pi}{L}l$ mit $l=1,\,2,\,...$

(b) Außerdem verschwindet die Wellenfunktion für $r>a$. Für $r\leq a$ erhält man die Differentialgleichung

$$r^2\partial_r^2R+r\partial_rR+\left[\left(\frac{2mE}{\hbar^2}-k_z^2\right)r^2-n^2\right]R=0.$$

Machen wir die Substitution $u=r\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}-k_z^2}$ so ergibt sich

$$u^2\partial_u^2\widetilde{R}+u\partial_u\widetilde{R}+\left[u^2-n^2\right]\widetilde{R}=0.$$

mit den Lösungen $\widetilde{R}(u) = J_n(u)$, wobei J_n die Besselfunktionen sind.

(Bemerkung: Die Besselfunktionen zweiter Gattung

$$Y_n(x) = \frac{J_n(x)\cos(n\pi) - J_{-n}(x)}{\sin(n\pi)}$$

sind auch Lösungen von der Bessel'schen DGL, welche linear unabhängig von J_n sind. Jedoch divergieren diese bei $x = 0$ und sind damit physikalisch nicht sinnvoll.)

Bei $r = a$ soll die Wellenfunktion außerdem verschwinden. Damit erhalten wir die Quantisierungsbedingung

$$J_n\left(a\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2} - k_z^2}\right) = 0$$

Sei γ_{np} die p-te Nullstelle der Besselfunktionen $J_n(x)$, so lässt sich das Energiespektrum ausdrücken durch

$$E_{pnl} = \frac{\hbar^2\gamma_{np}^2}{2ma^2} + \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}l^2$$

(c) In Abb. 2 ist das Spektrum E_{pnl} der obigen Bedingung für $n = 0$ (rot) und $n = 1$ (grün) als Funktion von $k_z = \frac{\pi}{L}l$ gezeigt. Die niedrigsten Energien sind im wesentlichen gegeben durch E_{10l} mit $l = 1, 2, ..., l_{\max}$, wobei $l_{\max}$ die Anzahl der Zustände im untersten Band ist, deren Energie niedriger als die des nächst höheren Bandes $n = 1$ ist, also $E_{10l_{\max}} < E_{111} < E_{10(l_{\max}+1)}$. Je größer das Verhältnis L/a, desto größer ist auch $l_{\max}$. Mit $\gamma = \gamma_{10} = 2,405$ sind also im Limes $a/L \ll 1$ die Energien des niedrigsten Bandes $p = 1$, $n = 0$ gegeben durch

$$E_{10l} = \frac{\hbar^2\gamma^2}{2ma^2} + \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}l^2.$$

D.h. durch Reduzierung des Durchmessers im Vergleich zu der Länge des Zylinders ist die einzig wichtige Quantenzahl im Niedrig-Energie-Sektor die Quantenzahl l, welche die Quantisierung des k_z-Wellenvektors vorgibt. Das Problem wird damit effektiv eindimensional.

2. Doppelmuldenpotenzial

Wir betrachten das Potenzial

$$V(x) = \begin{cases} \infty & b < |x| \\ v_0\delta(x) & |x| \leq b \end{cases}$$

mit $v_0 > 0$.

(a) Gegeben, dass $\psi(x)$ die Schrödinger-Gleichung löst, erhalten wir mittels des Paritätsoperators P

$$PH(x)\psi(x) = H(-x)\psi(-x) = H(x)\psi(-x) = H(x)(P\psi(x)) = E(P\psi(x))$$

Hierbei haben wir ausgenutzt, dass $H(-x) = H(x)$. Das heißt, auch $P\psi(x)$ erfüllt die Schrödinger-Gleichung. Die Eigenfunktionen des Paritätsoperators erfüllen $P\psi_{s/a} = \lambda_{s/a}\psi_{s/a}$. Da nun $P^2\psi_{s/a} = \psi_{s/a}$ gilt $\lambda_{s/a}^2 = 1$ und damit $\lambda_{s/a} = \pm 1$. Damit sind die entsprechenden Eigenfunktionen entweder symmetrisch oder anti-symmetrisch, d.h. $P\psi_{s/a}(x) = \psi_{s/a}(-x) = \pm\psi_{s/a}(x)$.

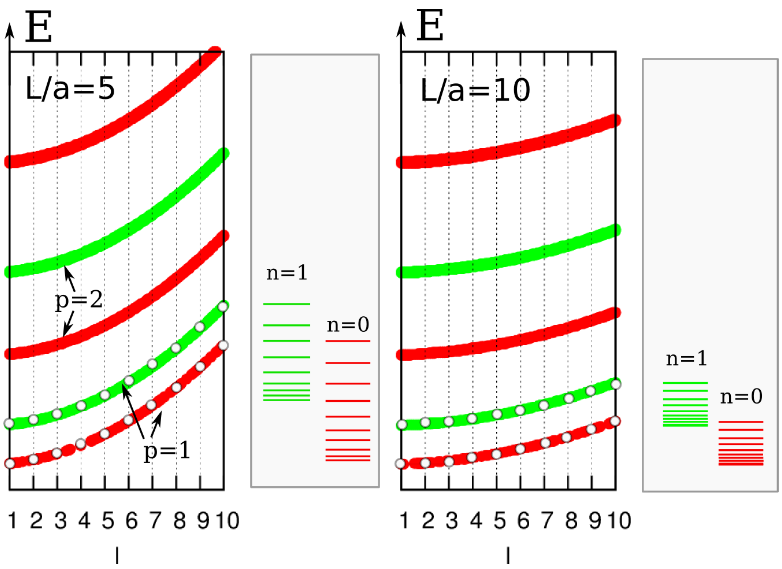

Abbildung 2: Energiespektrum E_{pnl}.

(b) Wir machen einen entsprechenden Ansatz für die symmetrische und anti-symmetrische Wellenfunktion,

$$\psi_s(x) = \begin{cases} A\sin(k[b+x]), & -b < x < 0 \\ A\sin(k[b-x]), & 0 \geq x < b \end{cases}$$

$$\psi_a(x) = \begin{cases} -A'\sin(k[b+x]), & -b < x < 0 \\ A'\sin(k[b-x]), & 0 \geq x < b \end{cases}$$

mit $\hbar k = \sqrt{2mE}$. Durch diesen Ansatz ist die Wellenfunktion bei $|x| = b$ automatisch gleich null und stetig bei $x = 0$. Schauen wir uns die Anschlussbedingung von $\partial\psi$ bei $x = 0$ an, so erhalten wir zunächst für die symmetrische Wellenfunktion

$$\lim_{\epsilon\to 0} \partial\psi(+\epsilon) - \lim_{\epsilon\to 0} \partial\psi(-\epsilon) = \frac{2mv_0}{\hbar^2}\psi(0) \tag{1}$$

$$-kA\cos(kb) - kA\cos(kb) = \frac{2mv_0}{\hbar^2}A\sin(kb) \tag{2}$$

und damit

$$-\frac{1}{k}\tan(kb) = \frac{\hbar^2}{mv_0} \tag{3}$$

Für die anti-symmetrische Wellenfunktion erhalten wir

$$-kA'\cos(kb) + kA'\cos(kb) = \frac{2mv_0}{\hbar^2}A'\sin(kb)$$

und damit

$$\sin(kb) = 0 \quad \Rightarrow k_l = \frac{\pi}{b}l \quad (l = 1, 2, 3, ...) \tag{4}$$

(c) Im Grenzfall $v_0 \to \infty$ hätten wir gerade den Fall zweier getrennter Potenzial-Töpfe mit dem Spektrum $\epsilon_l = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mb^2}l^2$ $(l = 1, 2, 3, ...)$. Jede Energie wäre in diesem Fall zweifach entartet. Für endliches v_0 kommt es zu einer Energieaufspaltung dieser Niveaus, d.h. die Entartung wird aufgehoben. Wir betrachten nun den Grenzfall

$v_0 \gg \frac{\hbar^2}{mb}$, um ein approximatives Resultat für die Aufspaltung der untersten zwei Niveaus zu erhalten:
Für $v_0 \to \infty$ gilt $E_1 = E_2 = \epsilon_1$, korrespondierend zu dem Wellenvektor $k_1 = \frac{\pi}{b}$. Für endliches v_0 entwickeln wir nun die Bedingung (3) für die Energie des **symmetrischen** Zustands um den Entartungspunkt $k_1 = \pi/b$, d.h.

$$-\frac{1}{k}\tan(kb) = -\frac{1}{k}\tan(b[k-\pi/b]+\pi) = \frac{\pi - bk}{k} = \frac{\hbar^2}{mv_0}$$

und damit

$$k = \frac{\pi}{b + \frac{\hbar^2}{mv_0}}$$

Mit $E = \hbar^2 k^2/2m$ erhalten wir gerade

$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m\left(b + \frac{\hbar^2}{mv_0}\right)^2} \approx \frac{\hbar^2\pi^2}{2mb^2}\left(1 - \frac{2\hbar^2}{mv_0 b}\right)$$

Die Energie des **anti-symmetrischen** Zustandes ist gerade $E_2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mb^2}$ und damit ist die Energieaufspaltung gegeben durch

$$\Delta E = \frac{\hbar^4\pi^2}{m^2 b^3 v_0}.$$

(d) In Abb. 3 auf der linken Seite sind die beiden energetisch niedrigsten Zustände skizziert. ψ_1 und ψ_2 sind jeweils symmetrisch bzw. anti-symmetrisch um den Ursprung, die Betragsquadrate der Wellenfunktionen sind aber gleich. Entsprechend, bildet man eine Superposition der beiden Zusände, wie in der Aufgabe verlangt, so wäre das Teilchen bei $t = 0$ gänzlich in der linken Mulde lokalisiert.

Die beiden Wellenfunktion ψ_1 und ψ_2 sind Eigenfunktionen des Hamilton-Operators, d.h. Sie erfüllen die Eigenwertgleichung

$$H\psi_{1,2} = E_{1,2}\psi_{1,2}$$

Entsprechend der Schrödinger-Gleichung $i\hbar\partial_t\psi_{1,2} = H\psi_{1,2} = E_{1,2}\psi_{1,2}$ erhalten wir für deren Zeitentwicklung $\psi_{1,2}(x,t) = \psi_{1,2}(x,0)\exp(-iE_{1,2}t/\hbar)$. Initialisieren wir also den Anfangszustand durch

$$\psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\psi_1(x,0) + \psi_2(x,0)\big),$$

so gilt für die Zeitentwicklung

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\psi_1(x,0)e^{-iE_1t/\hbar} + \psi_2(x,0)e^{-iE_2t/\hbar}\big),$$

und damit für das Betragsquadrat

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2}\big(|\psi_1(x,0)|^2 + |\psi_2(x,0)|^2 + 2\psi_1(x,0)\psi_2(x,0)\cos(\Delta E t/\hbar)\big)$$

Anfangs bei $t_1 = 0$ ist die Welle in der linken Potenzial-Mulde lokalisiert. Für $t_2 > 0$ hat das Teilchen dann auch eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der rechten Mulde, bis bei $t_3 = \pi\hbar/\Delta E$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der

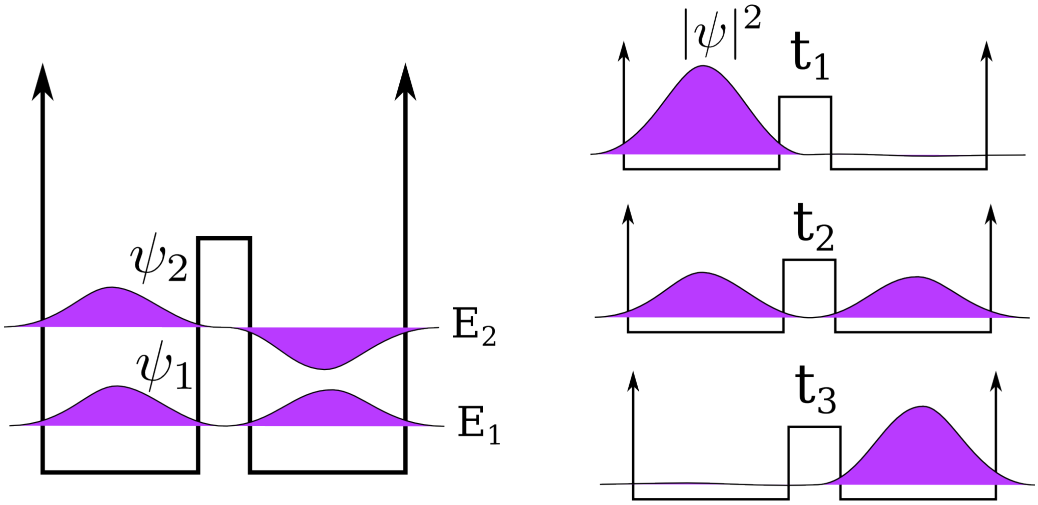

Abbildung 3: Doppelmuldenpotenzial

rechten Mulde maximal wird (siehe Abb. 4). Das Teilchen oszilliert also zwischen den Potenzial-Mulden hin und her.

Bemerkung: Als physikalisches Modell könnten wir uns z.B. ein H_2^+-Molekül, d.h. ein einfach ionisiertes Wasserstoff-Molekül vorstellen. Jedes Proton entspräche hierbei einer der Potenzial-Mulden. Die beiden Zustände ψ_1 und ψ_2, deren Energieaufspaltung wir in Aufgabenteil (c) berechnet haben, bezeichnet man in der Molekülphysik gemeinhin als **bindenden** und **anti-bindenden** Zustand.

3. Hermite'sche Polynome

Die Hermite'schen Polynome sind gegeben durch

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \partial_z^n e^{-z^2}$$

(a) Zunächst zeigen wir, dass die Funktion e^{-t^2+2zt} die erzeugende Funktion der Hermite'schen Polynome ist, d.h.

$$F(z,t) \equiv e^{-t^2+2zt} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(z). \tag{5}$$

Dafür nutzen wir den Hinweis auf dem Aufgabenblatt aus,

$$\begin{aligned} e^{-t^2+2zt} = e^{z^2-z^2-t^2+2zt} = e^{z^2} e^{-(z-t)^2} &= e^{z^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \partial_t^n e^{-(z-t)^2} \Big|_{t=0} \\ &= e^{z^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} (-1)^n \partial_z^n e^{-(z-t)^2} \Big|_{t=0} \\ &= e^{z^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} (-1)^n \partial_z^n e^{-z^2} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(z) \end{aligned}$$

(b) Wieder nutzen wir den Hinweis, um die Rekursionsrelationen für H_n herzuleiten:

$$\begin{aligned} \partial_z F = 2tF = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \partial_z H_n(z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^{n+1}}{(n+1)!} \partial_z H_{n+1}(z) \\ \to 2tF = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^{n+1}}{n!} H_n(z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^{n+1}}{(n+1)!} \partial_z H_{n+1}(z) \end{aligned}$$

Hier wurde ausgenutzt, dass $\partial_z H_0 = 0$ ist. Ein Koeffizientenvergleich liefert die erste Rekursionsgleichung

$$\partial_z H_n(z) = 2n\, H_{n-1}(z). \tag{6}$$

Wenn wir F nach t ableiten, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \partial_t F &= (-2t+2z) e^{-t^2+2zt} \\ &= -\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2t^{n+1}}{n!} H_n(z) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2zt^n}{n!} H_n(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{nt^{n-1}}{n!} H_n(z) \\ \to &\sum_{n=0}^{\infty} \frac{-2t^n}{(n-1)!} H_{n-1}(z) + \frac{2zt^n}{n!} H_n(z) - \frac{(n+1)t^n}{(n+1)!} H_{n+1}(z) = 0 \end{aligned}$$

Hierbei sind H_{-1} und H_{-2} nicht definiert. Wir setzen diese daher formhalber gleich null. Ein Koeffizientenvergleich sogleich

$$-2nH_{n-1}(z) + 2zH_n(z) - H_{n+1}(z) = 0$$

und damit

$$H_{n+1}(z) = 2z\, H_n(z) - 2nH_{n-1}(z) \tag{7}$$

Mit Hilfe der beiden Rekursionsgleichung lässt sich die Differentialgleichung für die Hermite'schen Polynome herleiten

$$\begin{aligned} \partial_z^2 H_n &= 2n\partial_z H_{n-1} = 4n(n-1)H_{n-2} \\ -2z\partial_z H_n &= -4nzH_{n-1} \end{aligned}$$

Mit (7) erhalten wir dann

$$4n(n-1)H_{n-2} - 4nzH_{n-1} + 2nH_n = \big[\partial_z^2 - 2z\partial_z + 2n\big]H_n(z) = 0 \tag{8}$$

(c) Multiplizieren wir die DGL (8) von links mit $e^{-z^2}H_m$ und integrieren über z, so ergibt sich

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-z^2} H_m\big(\partial_z^2 - 2z\partial_z\big)H_n = -2n\int_{-\infty}^{\infty} dz\, e^{-z^2} H_m(z)H_n(z)$$

Die partielle Integration der linken Seite liefert

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-z^2} H_m\big(\partial_z^2 - 2z\partial_z\big)H_n &= e^{-z^2} H_m \partial_z H_n\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dz\Big(\partial_z e^{-z^2} H_m\Big)\partial_z H_n \\ &\quad + \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-z^2} H_m\big(-2z\partial_z\big)H_n \\ &= -\int_{-\infty}^{\infty} de^{-z^2}\big(\partial_z H_m\big)\big(\partial_z H_n\big) \end{aligned}$$

Damit

$$-\int_{-\infty}^{\infty} de^{-z^2}\big(\partial_z H_m\big)\big(\partial_z H_n\big) = -2n\int_{-\infty}^{\infty} dz\, e^{-z^2} H_m(z)H_n(z)$$

vertauschen wir m und n, so haben wir

$$-\int_{-\infty}^{\infty} de^{-z^2}\big(\partial_z H_n\big)\big(\partial_z H_m\big) = -2m\int_{-\infty}^{\infty} dz\, e^{-z^2} H_m(z)H_n(z)$$

Subtrahieren wir beide Gleichungen, so ergibt sich

$$(2n-2m)\int_{-\infty}^{\infty} dz\, e^{-z^2} H_m(z)H_n(z) = 0$$

Damit muss für $m \neq n$ gelten

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz\, e^{-z^2} H_m(z)H_n(z) = 0$$