

Exercise 6.1 Gebundene Zustände im Potentialkasten

1. Eine mögliche Argumentation ist wie folgt: Die physikalische Situation sollte sich bloss geringfügig ändern, wenn wir die Kanten von V etwas glätten, also z.B. durch ein glattes $0 \geq V_\lambda \geq V$ ersetzen mit $\lim_{\lambda \rightarrow 0} V_\lambda(x) = V(x)$ für alle $x \in \mathbb{R}$ und $V_\lambda(x) = V(x)$ ausser auf kleinen Umgebungen $(-a - \lambda, -a + \lambda)$ und $(a - \lambda, a + \lambda)$ der Sprungstellen. In diesem Fall ist $\psi_\lambda(x)$ (die Lösung der Schrödingergleichung abhängig vom Parameter λ) überall zweimal stetig differenzierbar und für $\lambda > 0$ kriegen wir:

$$\underbrace{\int_{a-\lambda}^{a+\lambda} dx \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_\lambda(x) \right)}_{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \psi_\lambda(x) \Big|_{a-\lambda}^{a+\lambda}} + \int_{a-\lambda}^{a+\lambda} dx V_\lambda(x) \psi_\lambda(x) = \int_{a-\lambda}^{a+\lambda} dx E \psi_\lambda(x).$$

Der zweite Integrand auf der linken Seite und der erste Integrand auf der rechten Seite verschwinden für $\lambda \rightarrow 0^1$, daher lautet die vernünftige Randbedingung ($\lambda \rightarrow 0$):

$$\frac{d}{dx} \psi(a^+) = \frac{d}{dx} \psi(a^-),$$

wobei $\psi(a^+) := \lim_{x \rightarrow a, x > a} \psi(x)$ und $\psi(a^-)$ analog definiert ist. Die analoge Rechnung für $x = -a$ zeigt, dass $\frac{d}{dx} \psi(x)$ auf ganz \mathbb{R} stetig ist. Indem man nochmals integriert kann man diese Argumentation wiederholen, um die Stetigkeit von $\psi(x)$ zu zeigen. Die Forderung, dass $\psi(x)$ stetig ist, entspricht der Stetigkeit der Wahrscheinlichkeitsdichte, die Forderung für die Ableitung entspricht der Stetigkeit des Wahrscheinlichkeitsstromes.

Natürlich ergeben sich diese Bedingungen auch einfach, indem man formal die zeitunabhängige Schrödingergleichung über die Sprungstellen integriert.

Eine andere Argumentation wäre zu verifizieren, dass Lösungen, die stetig differenzierbar zusammengeklebt werden, gerade die zeitunabhängige Schrödingergleichung im Sinne von Distributionen erfüllen.

2. Es genügt anzunehmen, dass $E \geq -V_0$ (z.B. weil nur dann die Randbedingungen erfüllt werden können oder allgemeiner, weil $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ durch $-V_0$ nach unten beschränkt ist). Wir definieren $k_1 := \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$ und $k_2 := \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$.

In Teilgebiet I lautet die allgemeine Lösung

$$\psi(x) = A e^{k_1 x} + B e^{-k_1 x}.$$

In Teilgebiet II lautet die allgemeine Lösung

$$\psi(x) = C \cos(k_2 x) + D \sin(k_2 x).$$

Wir haben aus Bequemlichkeitsgründen reelle Fundamentallösungen gewählt. Dies ist möglich, da H ein reeller Operator ist, also mit komplexer Konjugation vertauscht. Ferner

¹z.B. mit der Ungleichung von Cauchy-Schwarz auf $L^2([a - \lambda, a + \lambda])$ und normiertem ψ_λ : $|\int_{a-\lambda}^{a+\lambda} dx V_\lambda(x) \psi_\lambda(x)| \leq V_0 \sqrt{2\lambda}$ und genau gleich für die anderen Terme.

sind diese Fundamentallösungen gerade symmetrisch ($\cos(k_2x)$) resp. antisymmetrisch ($\sin(k_2x)$), was eine Folgerung der Symmetrie des Potentials ist.

In Teilgebiet III lautet die allgemeine Lösung

$$\psi(x) = Ee^{k_1x} + Fe^{-k_1x}.$$

Da ψ quadratintegrabel ist, gilt $B = E = 0$. Die übrigen Konstanten bestimmen wir aus der Stetigkeit von $\psi(x)$ und $\frac{d}{dx}\psi(x)$:

$$\begin{aligned} Ae^{-k_1a} &= C \cos(k_2a) - D \sin(k_2a) \\ k_1 Ae^{-k_1a} &= k_2 C \sin(k_2a) + k_2 D \cos(k_2a) \\ Fe^{-k_1a} &= C \cos(k_2a) + D \sin(k_2a) \\ -k_1 Fe^{-k_1a} &= -k_2 C \sin(k_2a) + k_2 D \cos(k_2a) \end{aligned}$$

Aus den ersten beiden Gleichungen erhalten wir

$$k_1 = k_2 \frac{C \sin(k_2a) + D \cos(k_2a)}{C \cos(k_2a) - D \sin(k_2a)},$$

aus den letzten beiden

$$k_1 = k_2 \frac{C \sin(k_2a) - D \cos(k_2a)}{C \cos(k_2a) + D \sin(k_2a)}.$$

Gleichsetzen ergibt

$$\frac{C \sin(k_2a) + D \cos(k_2a)}{C \cos(k_2a) - D \sin(k_2a)} = \frac{C \sin(k_2a) - D \cos(k_2a)}{C \cos(k_2a) + D \sin(k_2a)}$$

und daher $CD = 0$, d.h. entweder $C = 0$ oder $D = 0$: Wie zu erwarten sind die Eigenzustände gerade oder ungerade. Für die geraden Lösungen ($D = 0$) erhalten wir ($k_1^2 + k_2^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$)

$$\tan(y) = \tan(k_2a) = \frac{k_1}{k_2} = \frac{\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k_2^2}}{k_2} = \frac{\sqrt{U_0 - y^2}}{y},$$

wobei $y := ak_2$ und $U_0 := \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}$. Um die Gleichung zu lösen, bestimmen wir die Schnittpunkte der Funktionen $y \mapsto \tan(y)$ und $y \mapsto \frac{\sqrt{U_0 - y^2}}{y}$. Dies kann man numerisch/graphisch tun (explizites Lösen geht nicht, da die Gleichungen transzendent sind). Durch scharfes Hinsehen sieht man aber auch so, dass mindestens ein Schnittpunkt existieren muss. Die Zahl der Schnittpunkte wird grösser, je grösser die Nullstelle $y_0 = \sqrt{U_0} = \frac{\sqrt{2mV_0}a}{\hbar}$ von $\frac{\sqrt{U_0 - y^2}}{y}$ ist.

Für die ungeraden Lösungen ($C = 0$) erhalten wir die Gleichung

$$-\cot(y) = \frac{\sqrt{U_0 - y^2}}{y},$$

welche erst für genügend grosse Werte von U_0 reelle Lösungen aufweist.

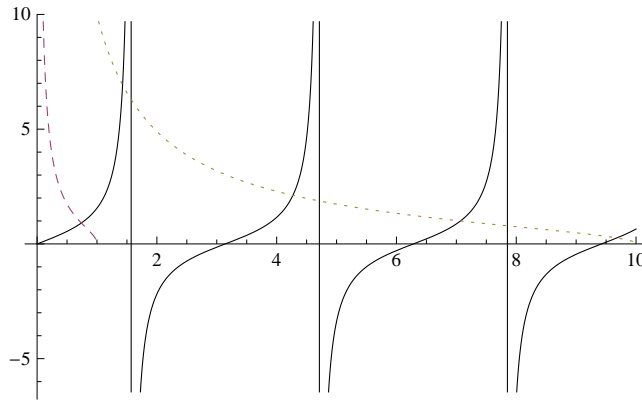


Figure 1: Die gestrichelte Linie beschreibt $\frac{(1-y^2)^{1/2}}{y}$, die gepunktete $\frac{(100-y^2)^{1/2}}{y}$ und die durchgezogene $\tan(y)$.

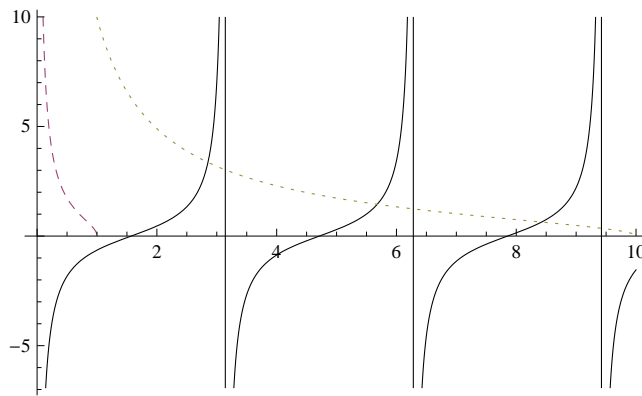


Figure 2: Die gestrichelte Linie beschreibt $\frac{(1-y^2)^{1/2}}{y}$, die gepunktete $\frac{(100-y^2)^{1/2}}{y}$ und die durchgezogene $-\cot(y)$.

Exercise 6.2 Gebundene Zustände im δ -Potential

1. Analog zur Aufgabe 6.1 stellen wir uns eine ähnliche, jedoch regulärere Situation vor: Wir ersetzen V durch $V_\lambda(x) = -g\frac{1}{\lambda}\varphi(\frac{x}{\lambda})$, wobei $\varphi(x)$ eine positive, glatte Funktion mit $\int_{\mathbb{R}} \varphi(x)dx = 1$ ist mit Träger in $[-1, 1]$. Für kleine λ ist V_λ also eine gute Approximation für die δ -Distribution. Für $\lambda > 0$ kriegen wir

$$\underbrace{\int_{0-\lambda}^{0+\lambda} dx \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_\lambda(x) \right)}_{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \psi_\lambda(x) \Big|_{0-\lambda}^{0+\lambda}} - \int_{0-\lambda}^{0+\lambda} dx g \frac{1}{\lambda} \varphi\left(\frac{x}{\lambda}\right) \psi_\lambda(x) = \int_{0-\lambda}^{0+\lambda} dx E_\lambda \psi_\lambda(x). \quad (1)$$

Das erste Integral auf der rechten Seite verschwindet im Limes $\lambda \rightarrow 0^2$. Das zweite Integral auf der linken Seite lässt sich umschreiben:

$$\int_{0-\lambda}^{0+\lambda} dx g \frac{1}{\lambda} \varphi\left(\frac{x}{\lambda}\right) \psi_\lambda(x) = \int_{-1}^1 dy g \varphi(y) \psi_\lambda(\lambda y) \quad (2)$$

Nehmen wir nun noch in (2) den Limes $\lambda \rightarrow 0$, dann kriegen wir aus (1) die physikalische

²Cauchy-Schwarz!

Sprungbedingung

$$\frac{d}{dx}\psi(0^+) - \frac{d}{dx}\psi(0^-) = -\frac{2mg}{\hbar^2}\psi(0).$$

Alternativ integriert man einfach formal die zeitunabhängige Schrödingergleichung oder zeigt (wenn man es genau nehmen möchte), dass ein ψ mit den obigen Randbedingungen bei $x = 0$ die zeitunabhängige Schrödingergleichung im Sinne von Distributionen erfüllt.

Bemerkung: Details zum Limes in (2): Man kann zeigen, dass die Vertauschung von Integral und Limes in der Tat erlaubt ist, was wir hier aber nicht tun. Dazu muss man sich überlegen, weshalb die ψ_λ in einer Umgebung von 0 gleichmässig in λ beschränkt sind. Würden sie explodieren, dann auch die rechts und linksseitigen Ableitungen von ψ , das tun diese aber nicht (man kann sie ausrechnen \rightarrow Teilaufgabe b)).

2. Sei $k > 0$ mit $-k^2 := \frac{2mE}{\hbar^2}$. Für negative x ist die allgemeine Lösung von $\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = k^2\psi(x)$

$$\psi(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx},$$

mit $A, B \in \mathbb{C}$. Da ψ quadratintegrabel sein muss, gilt $B = 0$. Für positive x lautet die zulässige Lösung

$$\psi(x) = Ce^{-kx}.$$

Stetigkeit von ψ im Ursprung ergibt $C = A$. Die Sprungbedingung der Ableitung ergibt

$$\begin{aligned} -k - k &= -\frac{2mg}{\hbar^2} \\ \Rightarrow k &= \frac{mg}{\hbar^2} \end{aligned}$$

Die Energie des gebundenen Zustandes ist also gerade

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{mg^2}{2\hbar^2}.$$

Bemerkung. Als gewöhnliche Differentialgleichung aufgefasst hat die zeitunabhängige Schrödingergleichung für alle Werte von E zwei linear unabhängige Lösungen. Erst die Forderung, dass diese Lösungen in $L^2(\mathbb{R})$ liegen müssen, zeichnet ganz bestimmte Werte von E (Energieeigenwerte) aus.

Exercise 6.3 Instabilität eines Teilchens im Zentralpotential

1. Das Spektrum eines Hamiltonoperators A ist definiert als $\sigma(A) := \{z \in \mathbb{C} : A - z \text{ ist nicht invertierbar}\}$. Für unitäre Transformationen gilt:

$$\sigma(UAU^*) = \{z \in \mathbb{C} : UAU^* - z \text{ ist nicht invertierbar}\} = \{z \in \mathbb{C} : U(A - z)U^* \text{ ist nicht invertierbar}\}.$$

Da der letzte Ausdruck genau dann nicht invertierbar ist, wenn $A - z$ nicht invertierbar ist, folgt die Behauptung.

2. U_θ ist offensichtlich surjektiv und ausserdem isometrisch, denn für $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ gilt:

$$\|U_\theta\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} dx \theta^{-3} |\psi(\theta^{-1}x)|^2 \stackrel{y=\theta^{-1}x}{=} \int_{\mathbb{R}^3} dy |\psi(y)|^2 = \|\psi\|^2.$$

Es folgt, dass U_θ unitär ist und daher $U_\theta^* = (U_\theta)^{-1} = U_{\theta^{-1}}$.

3.

$$\begin{aligned}
(HU_{\theta^{-1}}\psi)(x) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x - \frac{g}{r^s}\right)\psi(\theta x)\theta^{\frac{3}{2}} \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_y\psi(y)|_{y=\theta x} \cdot \theta^2 \cdot \theta^{\frac{3}{2}} - \frac{g}{r^s}\psi(\theta x)\theta^{\frac{3}{2}} \\
\Rightarrow (U_{\theta}HU_{\theta^{-1}}\psi)(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_y\psi(y)|_{y=x} \cdot \theta^2 \cdot \theta^{\frac{3}{2}} \cdot \theta^{-\frac{3}{2}} - \frac{g}{\theta^{-s}r^s}\psi(x) \\
&= \theta^2\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x\psi(x) - \frac{g\theta^{s-2}}{r^s}\psi(x)\right\}
\end{aligned}$$

4. Das ergibt sich aus dem Skalierungsverhalten, das in Teilaufgabe 3 gezeigt wurde: Für jeden Energieerwartungswert ist auch der mit θ^2 reskalierte Erwartungswert zulässig. Der Limes $\theta \rightarrow 0$ zeigt, dass die grösste untere Schranke für H sicher kleiner als Null ist, der Limes $\theta \rightarrow \infty$ schliesst negative Erwartungswerte aus, da wir angenommen haben, dass H nach unten beschränkt ist. (Diese Worte paraphrasieren das folgende Argument: Angenommen $a \neq 0$ sei die grösste untere Schranke $\Rightarrow \forall \varepsilon > 0 : \exists \psi_{\varepsilon} \in \mathcal{D}(H)$:

$$\langle \psi_{\varepsilon}, H, \psi_{\varepsilon} \rangle = (a + \varepsilon)\|\psi_{\varepsilon}\|^2$$

Unter Verwendung von $U_{\theta}\mathcal{D}(H) = \mathcal{D}(H)$ kriegen wir

$$\langle U_{\theta}^*\psi_{\varepsilon}, HU_{\theta}^*\psi_{\varepsilon} \rangle = \theta^2\langle \psi_{\varepsilon}, H\psi_{\varepsilon} \rangle = \theta^2(a + \varepsilon)\|\psi_{\varepsilon}\|^2.$$

Falls $a > 0$ kriegen wir im Limes $\theta \rightarrow 0$ einen Widerspruch. Falls $a < 0$ wählen wir ε so klein, dass $a + \varepsilon < 0$. Der Limes $\theta \rightarrow \infty$ ergibt einen Widerspruch zur Annahme, dass H nach unten beschränkt ist.)

5. Wir überprüfen die Normiertheit von ψ_{ξ} :

$$\|\psi_{\xi}\|^2 = \frac{1}{\xi^3\pi^{\frac{3}{2}}}\int_{\mathbb{R}^3} d^3x e^{-\frac{x^2}{\xi^2}} = \frac{1}{\xi^3\pi^{\frac{3}{2}}}\int_{\mathbb{R}^3} d^3y \xi^3 e^{-y^2} = 1.$$

Der Erwartungswert bezüglich ψ_{ξ} lautet:

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{\xi}, H\psi_{\xi} \rangle &= \frac{1}{\xi^3\pi^{\frac{3}{2}}}\int_{\mathbb{R}^3} d^3x e^{-\frac{x^2}{2\xi^2}} \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{g}{r^s}\right\} e^{-\frac{x^2}{2\xi^2}} \\
&\stackrel{\text{partielle Integration}}{=} \frac{\hbar^2}{2m\xi^3\pi^{\frac{3}{2}}}\int_{\mathbb{R}^3} d^3x (\nabla e^{-\frac{x^2}{2\xi^2}})^2 - \frac{1}{\xi^3\pi^{\frac{3}{2}}}\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \frac{g}{r^s} e^{-\frac{x^2}{2\xi^2}} \\
&= \frac{\hbar^2}{2m\xi^3\pi^{\frac{3}{2}}}\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \left(\frac{x}{\xi^2} e^{-\frac{x^2}{2\xi^2}}\right)^2 - \frac{1}{\pi^{\frac{3}{2}}}\int_{\mathbb{R}^3} d^3y \frac{g}{|y|^s \xi^s} e^{-y^2} \\
&= C_1 \frac{1}{\xi^2} - C_2 \frac{1}{\xi^s},
\end{aligned}$$

wobei C_1, C_2 zwei von ξ unabhängige positive Konstanten sind. Für $s > 2$ strebt dieser Ausdruck nach $-\infty$, wenn unser Zustand stärker und stärker im Ursprung konzentriert ist ($\xi \rightarrow 0$).