Übung 1. Sokhotski-Plemelj Formel

Es gilt:

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \frac{x \mp i\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2} = \frac{x}{x^2+\varepsilon^2} \mp i\pi \, \frac{\varepsilon/\pi}{x^2+\varepsilon^2} \ . \tag{L.1}$$

In Serie 5, Übung 1 haben wir gezeigt, dass für $\varepsilon \to 0$, $\varepsilon/(\pi(x^2+\varepsilon^2)) \to \delta(x)$. Es bleibt zu zeigen, dass der erste Term in (L.1) zum Hauptwert konvergiert. Gegeben eine Test-Funktion f, kann man schreiben,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{x}{x^2+\varepsilon^2}\, f(x)\, dx = \int_{\mathbb{R}\setminus[-\eta,\eta]} \frac{x^2}{x^2+\varepsilon^2}\frac{f(x)}{x}\, dx + \int_{-\eta}^{\eta} \frac{x^2}{x^2+\varepsilon^2}\, \frac{f(x)}{x}\, dx \ , \tag{L.2}$$

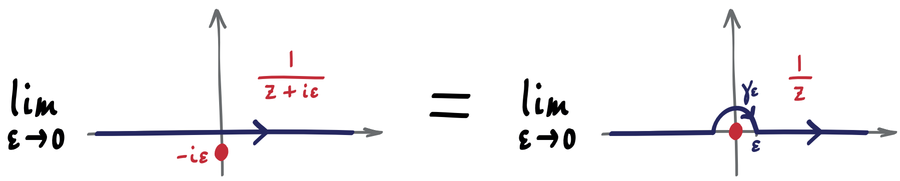
für $\eta > 0$ beliebig. Für ein kleines η kann man $f(x)$ im zweiten Term entwickeln als $f(x) = f(0) + x f'(0) + \ldots$; somit folgt

$$\lim_{\varepsilon\to 0} (\text{L.2}) = \int_{\mathbb{R}\setminus[-\eta,\eta]} \frac{f(x)}{x}\, dx + \lim_{\varepsilon\to 0}\left(f(0) \int_{-\eta}^{\eta} \frac{x}{x^2+\varepsilon^2}\, dx + f'(0) \int_{-\eta}^{\eta} \frac{x^2}{x^2+\varepsilon^2}\, dx + \cdots \right) \ . \tag{L.3}$$

Das erste Integral im Klammer ist genau Null, da der Integrand antisymmetrisch ist. Im Limes $\varepsilon \to 0$ verhalten sich die anderen Termen im Klammer schön und divergieren nicht, lassen jedoch Termen der Ordnung $O(\eta)$. Diese Rechnung gilt für ein beliebiges (klein genug) $\eta > 0$; wenn wir $\eta \to 0$ nehmen, dann bleibt nur das erste Term in (L.3), der die Definition des Cauchyschen Hauptwert entspricht. Schlussendlich vereinfacht sich (L.1) zu

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = P\frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x) \ . \tag{L.4}$$

Die Sokhotski-Plemelj kann man auch so verstehen, indem dass im Limes $\varepsilon \to 0$ die Integration auf der reellen Achse über die regularisierte Funktion dasselbe ergibt wie die Integration der nicht-regularisierten Funktion auf einem Weg, der den Pol vermeidet:



Intuitiv ist der Beitrag zur Integral vom Pol in einer oder der anderer Art berücksichtigt. (Es sollen eigentlich jeweils das $1/(z+i\varepsilon)$ und $1/z$ auf eine Test-Funktion angewendet, aber intuitiv für kleines ε sieht lokal die Test-Funktion um 0 wie eine Konstante aus.)

Wenn wir das Integral gemäss der rechten Seite der Figur durchführen, dann finden wir

$$\begin{aligned} &\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\int_{-\infty}^{-\varepsilon} \frac{f(x)}{x}\, dx + \int_{\gamma_\varepsilon} \frac{f(z)}{z}\, dz + \int_{\varepsilon}^{\infty} \frac{f(x)}{x}\, dx\right] \\ &\quad = (P\frac{1}{x})\,[f] + \lim_{\varepsilon\to 0} \int_{\pi}^{0} d\varphi\, i\varepsilon\, e^{i\varphi}\, \frac{f(\varepsilon e^{i\varphi})}{\varepsilon e^{i\varphi}} \\ &\quad = (P\frac{1}{x})\,[f] - i\int_0^{\pi} d\varphi\, \lim_{\varepsilon\to 0} f(\varepsilon e^{i\varphi}) = (P\frac{1}{x})\,[f] - i\pi f(0) \ . \end{aligned} \tag{L.5}$$

Sollte der Nenner $1/(x-i\epsilon)$ im ursprünglichen Integral (auf der linke Seite der Figur) sein, dann wäre der ursprüngliche Pol bei $z=+i\varepsilon$ und wir hätten ein γ_ε wählen müssen, das *unter* dem Pol enlangläuft. Im diesen Fall erhält man in Gl. (L.5) den Wert $(P\frac{1}{x})\,[f]+i\pi f(0)$. Wir finden dann wieder jeweils die Sokhotski-Plemelj Formel,

$$\frac{1}{x\pm i\varepsilon}=P\frac{1}{x}\mp i\pi\delta\ . \tag{L.6}$$

Übung 2. Radialteil des Laplace-Operators

(a) Man rechnet direkt

$$\begin{aligned}\left(\partial_r^2+\frac{2}{r}\partial_r\right)\frac{u}{r^\alpha}&=\partial_r\left(\frac{u'}{r^\alpha}-\frac{\alpha u}{r^{\alpha+1}}\right)+\frac{2}{r}\left(\frac{u'}{r^\alpha}-\frac{\alpha u}{r^{\alpha+1}}\right)\\&=\frac{u''}{r^\alpha}-\frac{\alpha u'}{r^{\alpha+1}}-\frac{\alpha u'}{r^{\alpha+1}}+\frac{\alpha\,(\alpha+1)\,u}{r^{\alpha+2}}+\frac{2u'}{r^{\alpha+1}}-\frac{2\alpha u}{r^{\alpha+2}}\\&=\frac{u''}{r^\alpha}+\frac{(2-2\alpha)\,u'}{r^{\alpha+1}}+\frac{\alpha\,(\alpha-1)\,u}{r^{\alpha+2}}\ .\end{aligned} \tag{L.7}$$

Wir merken, dass für $\alpha=1$ die zwei letzten Terme verschwinden und es folgt bleibt

$$\varDelta_r R(r)=\frac{u''}{r}\ . \tag{L.8}$$

(b) Analog zur vorherigen Teilaufgabe rechnen wir

$$\begin{aligned}\left(\partial_r^2+\frac{1}{r}\partial_r\right)\frac{u}{r^\alpha}&=\partial_r\left(\frac{u'}{r^\alpha}-\frac{\alpha u}{r^{\alpha+1}}\right)+\frac{1}{r}\left(\frac{u'}{r^\alpha}-\frac{\alpha u}{r^{\alpha+1}}\right)\\&=\frac{u''}{r^\alpha}-\frac{\alpha u'}{r^{\alpha+1}}-\frac{\alpha u'}{r^{\alpha+1}}+\frac{\alpha\,(\alpha+1)\,u}{r^{\alpha+2}}+\frac{u'}{r^{\alpha+1}}-\frac{\alpha u}{r^{\alpha+2}}\\&=\frac{u''}{r^\alpha}+\frac{(1-2\alpha)\,u'}{r^{\alpha+1}}+\frac{\alpha^2 u}{r^{\alpha+2}}\ .\end{aligned} \tag{L.9}$$

Man sieht sofort, dass die beiden letzten Terme nicht gleichzeitig verschwinden können für irgendeine Wahl von α. Der Term proportional zu u' verschwindet jedoch mit $\alpha=1/2$, d.h. $R(t)=\frac{u(r)}{\sqrt{r}}$, und wir finden

$$\varDelta_r R(r)=\frac{u''}{\sqrt{r}}+\frac{u}{4r^{5/2}}\ . \tag{L.10}$$

(c) Mit dem Ansatz $R(r)=u(r)/\sqrt{r}$ findet man aus der Besselgleichung (5)

$$r^2\Big(\frac{u''}{\sqrt{r}}-\frac{1}{4r^2}\frac{u}{\sqrt{r}}\Big)+(r^2-\nu^2)\frac{u}{\sqrt{r}}=0, \tag{L.11}$$

$$\Leftrightarrow\quad u''+\Big(1-\frac{\nu^2-1/4}{r^2}\Big)u=0. \tag{L.12}$$

Für grosse r vereinfacht sich die Gleichung zu $u''+u=0$, sodass die zwei unabhängigen Lösungen $u^{(1)}(r\gg 1)\sim\cos(r+\phi_0)$ und $u^{(2)}(r\gg 1)\sim\sin(r+\phi_0)$ mit einer beliebigen Phase ϕ_0 sind und somit $R^{(1)}(r\gg 1)\sim\sin(r+\phi_0)/\sqrt{r}$ und $R^{(2)}(r\gg 1)\sim\cos(r+\phi_0)/\sqrt{r}$. Für die beiden unabhängigen Lösungen der Besselfunktionen erster und zweiter Art $J_\nu(r)$ und $Y_\nu(r)$ ist $\phi_0=-(2\nu+1)\pi/4$ und somit $J_\nu(r\gg 1)\sim\cos(r-\nu\pi/2-\pi/4)/\sqrt{r}$ und $Y_\nu(r\gg 1)\sim\sin(r-\nu\pi/2-\pi/4)/\sqrt{r}$.

Übung 3. 2D Potentialtopf und marginal gebundene Zustände

(a) Der Hamiltonoperator in 2D lässt sich einfach in Polarkoordinaten ausdrücken indem man den Laplaceoperator in Polarkoordinaten ausdrückt:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\text{2D}} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\big(\partial_r^2 + \frac{1}{r}\partial_r + \frac{1}{r^2}\partial_\varphi^2\big) + V(r). \tag{L.13}$$

Für die Schrödingergleichung $H\psi(r,\varphi) = E\psi(r,\varphi)$ ist es hilfreich, einen Ansatz $\psi(r,\varphi) = R_l(r)e^{il\varphi}$ zu wählen. Hierbei ist $l \in \mathbb{Z}$, damit die Periodizitätsbedingung $\psi(r,\varphi+2\pi) = \psi(r,\varphi)$ erfüllt ist. Für die radiale Wellenfunktion $R_l(r)$ ergibt sich die Gleichung

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\big(\partial_r^2 + \frac{1}{r}\partial_r - \frac{l^2}{r^2}\big) - V_0\Theta(r_0 - r)\Big)R_l(r) = ER_l(r). \tag{L.14}$$

Für $r < r_0$ finden wir

$$\Big(\partial_r^2 + \frac{1}{r}\partial_r - \frac{l^2}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)\Big)R_l(r) = 0, \tag{L.15}$$

was sich mit der Definition $k = \sqrt{2m(V_0+E)}/\hbar$, sowie $s = kr$ und $R_l(r) = f_l(kr)$ schreiben lässt als

$$\Big(s^2\partial_s^2 + s\partial_s + (s^2 - l^2)\Big)f_l(s) = 0, \tag{L.16}$$

Dies ist die Bessel-Gleichung, so dass sich die allgemeine Lösung als Linearkombination aus Bessel-Funktionen erster und zweiter Art darstellen lässt, $f_l(s) = a_l J_l(s) + b_l Y_l(s)$. Da die Wellenfunktion bei $s = 0$ regulär sein muss und die Bessel-Funktionen zweiter Art $Y_l(s)$ für $s \to 0$ divergieren, gilt $b_l = 0$. Somit finden wir für $r < r_0$ die Lösung $R_l(r) = a_l J_l(kr)$. Analog finden wir für $r > r_0$

$$\Big(\partial_r^2 + \frac{1}{r}\partial_r - \frac{l^2}{r^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\Big)R_l(r) = 0, \tag{L.17}$$

woraus sich mit $\alpha = \sqrt{2m(-E)}/\hbar$ und der Definition $\tilde{s} = \alpha r$ sowie $R_l(r) = \tilde{f}_l(\alpha r)$ die Gleichung

$$\Big(\tilde{s}^2\partial_{\tilde{s}}^2 + \tilde{s}\partial_{\tilde{s}} - (\tilde{s}^2 + l^2)\Big)\tilde{f}_l(\tilde{s}) = 0 \tag{L.18}$$

ergibt, welche der modifizierten Bessel-Gleichung entspricht. Somit ist die allgemeine Lösung eine Linearkombination der modifizierten Besselfunktionen $I_l(\tilde{s})$ und $K_l(\tilde{s})$ ist, $\tilde{f}_l(\tilde{s}) = c_l K_l(\tilde{s}) + d_l I_l(\tilde{s})$. Da $I_l(\tilde{s})$ für $\tilde{s} \to \infty$ divergiert und die Wellenfunktion endlich bleiben muss folgt $d_l = 0$ und somit finden wir die allgemeine Lösung

$$R_l(r) = \begin{cases} a_l J_l(kr), & r < r_0, \\ c_l K_l(\alpha r), & r > r_0. \end{cases} \tag{L.19}$$

Die Wellenfunktion $R_l(r)$ sowie die Ableitung $R_l'(r)$ müssen Stetigkeitsbedingungen bei $r = r_0$ erfüllen, woraus die beiden Bedingungen

$$a_l J_l(kr_0) = c_l K_l(\alpha r_0) \tag{L.20}$$
$$a_l k J_l'(kr_0) = c_l \alpha K_l'(\alpha r_0) \tag{L.21}$$

folgen. Division der beiden Bedingungen eliminiert die Koeffizienten und wir finden die transzendente Gleichung

$$k\frac{J_l'(kr_0)}{J_l(kr_0)} = \alpha\frac{K_l'(\alpha r_0)}{K_l(\alpha r_0)}, \tag{L.22}$$

welche die Energie der gebundenen Zustände bestimmt.

(b) Mithilfe der dimensionslosen Grösse $\xi_0 = \sqrt{2mV_0}r_0/\hbar$ sowie $\epsilon = E/V_0$ lässt sich die transzendente Gleichung schreiben als

$$\sqrt{1+\epsilon}\frac{J_l'(\xi_0\sqrt{1+\epsilon})}{J_l(\xi_0\sqrt{1+\epsilon})} = \sqrt{-\epsilon}\frac{K_l'(\xi_0\sqrt{-\epsilon})}{K_l(\xi_0\sqrt{-\epsilon})}. \tag{L.23}$$

Die Gleichung lässt sich numerisch lösen und liefert das Spektrum der gebundenen Zustände für $-1 < \epsilon < 0$ als Funktion der dimensionslosen Potentialstärke ξ_0, siehe Abbildung.

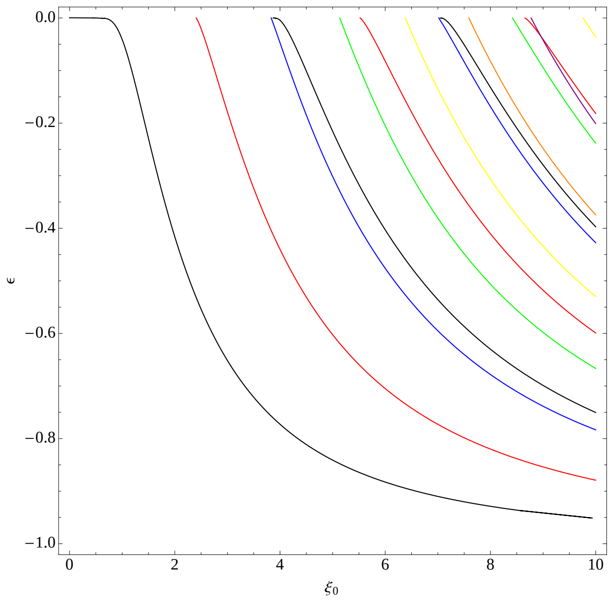


Abbildung 1: Die Energien der gebundenen Zustände $\epsilon_l = E_l/V_0$ als Funktion von ξ_0 mit ϵ_0 (schwarz), ϵ_1 (rot), ϵ_2 (blau), ϵ_3 (grün), ϵ_4 (gelb), ϵ_5 (orange) und ϵ_6 (violett).

Aus dem Spektrum erkennen wir insbesondere, dass es für beliebig kleine ξ_0 einen gebundenen Zustand für $l = 0$ gibt.

(c) Mithilfe der Asymptotik der Besselfunktionen, $J_0(x) \approx 1 - x^2/4$ und $K_0(x) \approx -\ln x$ für $x \approx 0$, sowie $J_0'(x) \approx -x/2$ und $K_0'(x) \approx -1/x$ folgt für $\xi_0 \ll 1$ die transzendente Gleichung

$$\sqrt{1+\epsilon}\frac{-\xi_0\sqrt{1+\epsilon}/2}{1-\xi_0^2(1+\epsilon)/4} = \sqrt{-\epsilon}\frac{-1/(\xi_0\sqrt{-\epsilon})}{-\ln(\xi_0\sqrt{-\epsilon})} \tag{L.24}$$

$$\Leftrightarrow \quad \ln(\xi_0\sqrt{-\epsilon}) = -\frac{1-\xi_0^2(1+\epsilon)/4}{\xi_0^2(1+\epsilon)/2} \approx -\frac{1}{\xi_0^2(1+\epsilon)/2} \tag{L.25}$$

$$\Leftrightarrow \quad \epsilon \approx -\frac{1}{\xi_0^2}e^{-4/[\xi_0^2(1+\epsilon)]}. \tag{L.26}$$

Im letzten Ausdruck sehen wir, dass für $\xi_0 \to 0$ die rechte Seite der Gleichung gegen 0 geht, sodass $\epsilon \to 0$. Somit können wir $\epsilon \ll 1$ für die rechte Seite benutzen und erhalten $\epsilon \approx -\frac{1}{\xi_0^2}e^{-4/\xi_0^2}$ und somit

$$E \approx -\frac{V_0}{\xi_0^2}e^{-4/\xi_0^2}. \tag{L.27}$$

Der gebundene Zustand ist für $\xi_0 \to 0$ nur exponentiell schwach gebunden, weshalb er auch als marginal bezeichnet wird.