Hannes Konrad
Martin Wolf
Stephan Bialek

1 Präsenzaufgabe P3: Hermitesche Polynome

Die Hermiteschen Polynome H_n sind definiert durch

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} e^{-x^2} \tag{1}$$

1.1 Teilaufgabe a)

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1 && (2)\\ H_1(x) &= 2x && (3)\\ H_2(x) &= 4x^2 - 2 && (4)\\ H_3(x) &= 8x^3 - 12x && (5) \end{aligned}$$

1.2 Teilaufgabe b)

Mittels quatratischer Ergänzung und der Substitution $\gamma \equiv x - t$ lässt sich zeigen:

$$\begin{aligned} H_n(x) &\stackrel{!}{=} \left. \frac{\partial^n}{\partial t^n} e^{2xt - t^2} \right|_{t=0} && (6)\\ &= \left. e^{x^2} \frac{\partial^n}{\partial t^n} e^{-(x-t)^2} \right|_{t=0} && (7)\\ &= \left. e^{x^2} \frac{d^n}{dt^n} e^{-\gamma^2} \right|_{t=0} && (8)\\ &= \left. e^{x^2} \frac{d^n \gamma}{dt^n} \frac{d^n}{d\gamma^n} e^{-\gamma^2} \right|_{t=0} && (9)\\ &= \left. (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{d\gamma^n} e^{-\gamma^2} \right|_{t=0} && (10) \end{aligned}$$

Mit der Beziehung

$$\frac{d^n}{dx^n} e^{-\gamma^2} = \frac{d\gamma^n}{dx^n} \frac{d^n}{d\gamma^n} e^{-\gamma^2} = \frac{d^n}{d\gamma^n} e^{-\gamma^2} \tag{11}$$

folgt nun weiter:

$$
\begin{aligned}
H_n(x) &\overset{!}{=} (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-\gamma^2}\Big|_{t=0} &(12)\\
&= (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} &(13)\\
&= H_n(x) &(14)
\end{aligned}
$$

2 Aufgabe H6: Spektrum des H-Atoms

Gegeben sei die Wellenfunktion eines gebundenen Zustandes mit Energie $E < 0$:

$$\psi_{Elm}(r, \theta, \phi) = f_{El}(r) Y_l^m(\theta, \phi) \tag{15}$$

Die Eigenwerte von L^2 und L_3 seien $\hbar^2 l(l+1)$ bzw. $\hbar m$. Wir definieren:

$$
\begin{aligned}
\epsilon &\equiv -\frac{2m_e E}{\hbar^2} &(16)\\
\beta &\equiv \frac{m_e e^2}{\hbar^2} &(17)\\
g_{\epsilon l}(r) &\equiv r f_{El}(r) &(18)\\
h_l &= \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\beta}{r}\right) &(19)
\end{aligned}
$$

2.1 Teilaufgabe a)

Ausgehend von der Schrödingergleichung des H-Atoms

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2}\right) + \frac{L^2}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{r}\right) \psi_{Elm}(r, \theta, \phi) = E\psi_{Elm}(r, \theta, \phi) \tag{20}$$

soll gezeigt werden, dass

$$h_l g_{\epsilon l}(r) = \epsilon g_{\epsilon l}(r) \tag{21}$$

gilt.

Mit der Gleichung 15 lässt sich der Winkelanteil der Wellenfunktion abseperieren und L^2 lässt sich durch dessen Eigenwert ersetzen, da $L^2 f_{El} = 0$. Es folgt also:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2}\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{r}\right) f_{El}(r) = E f_{El}(r) \tag{22}$$

Mit den Definitionen 16 und 17 und einer Multiplikation der Gleichung mit r lässt sich die Schrödingergleichung umformen zu:

$$\left(2\frac{\partial}{\partial r} + r\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r} + 2\beta\right) f_{El}(r) = \epsilon r f_{El}(r) \tag{23}$$

Mit den Definitionen 18 und 19 folgt für die linke Seite der Eigenwertgleichung 21

$$\begin{aligned}
h_l g_{\epsilon l}(r) &= \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\beta}{r}\right) r f_{El}(r) && (24)\\
&= \frac{\partial}{\partial r}\left(f_{El}(r) + r\frac{\partial}{\partial r} f_{El}(r)\right) - \frac{l(l+1)}{r} f_{El}(r) + 2\beta f_{El}(r) && (25)\\
&= \left(2\frac{\partial}{\partial r} + r\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r} + 2\beta\right) f_{El}(r) && (26)\\
&\overset{\text{Gl. } 23}{=} \epsilon r f_{El}(r) && (27)\\
&\overset{\text{Def. } 18}{=} \epsilon g_{\epsilon l}(r) && (28)
\end{aligned}$$

$g_{\epsilon l}(r)$ ist somit Eigenfunktion zu h_l mit dem Eigenwert ϵ. q.e.d.

2.2 Teilaufgabe b)

Es seinen die folgenden Operatoren gegeben:

$$a_l \equiv \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l}{r} - \frac{\beta}{l} \tag{29}$$

$$a_l^\dagger \equiv -\frac{\partial}{\partial r} + \frac{l}{r} - \frac{\beta}{l} \tag{30}$$

Außerdem sei das Skalarprodukt zweier Funktionen f und g mit den Eigenschaften

$$\begin{aligned}
f(0) &= g(0) = 0 && (31)\\
\langle f|g\rangle &< \infty \Leftrightarrow \lim_{r\to\infty} f(r) = \lim_{r\to\infty} g(r) = 0 && (32)
\end{aligned}$$

gegeben durch

$$\langle f|g\rangle \equiv \int_0^\infty dr\overline{f(r)}g(r) \tag{33}$$

Es soll gezeigt werden, dass die Operatoren adjungiert bezüglich es Skalarproduktes sind. Es muss also folgende Gleichung erfüllt sein:

$$\langle f|a_l g\rangle = \left\langle a_l^\dagger f|g\right\rangle \tag{34}$$

Es folgt:

$$\langle f|a_l g\rangle = \int_0^\infty dr\overline{f(r)}\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{l}{r}-\frac{\beta}{l}\right)g(r) \tag{35}$$

$$= \int_0^\infty dr\left(\frac{l}{r}-\frac{\beta}{l}\right)\overline{f(r)}g(r)+\int_0^\infty dr\overline{f(r)}\frac{\partial}{\partial r}g(r) \tag{36}$$

$$\overset{\text{part. Int.}}{=} \int_0^\infty dr\left(\frac{l}{r}-\frac{\beta}{l}\right)\overline{f(r)}g(r)+\underbrace{\left[\overline{f(r)}g(r)\right]_0^\infty}_{\overset{\text{Bez. 31,32}}{=}0}-\int_0^\infty dr\frac{\partial}{\partial r}\overline{f(r)}g(r) \tag{37}$$

$$\overset{\frac{l}{r},\frac{\beta}{l}\in\mathbb{R}}{=} \int_0^\infty dr\overline{\left(\frac{l}{r}-\frac{\beta}{l}\right)f(r)}g(r)-\int_0^\infty dr\frac{\partial}{\partial r}\overline{f(r)}g(r) \tag{38}$$

$$= \int_0^\infty dr\overline{\left(-\frac{\partial}{\partial r}+\frac{l}{r}-\frac{\beta}{l}\right)f(r)}g(r) \tag{39}$$

$$= \left\langle a_l^\dagger f|g\right\rangle \tag{40}$$

2.3 Teilaufgabe c)

Zu zeigen ist, dass gilt:

$$h_l = -a_l^\dagger a_l+\frac{\beta^2}{l^2} = -a_{l+1}^\dagger a_{l+1}+\frac{\beta^2}{(l+1)^2} \tag{41}$$

Für $h_l \overset{!}{=} -a_l^\dagger a_l+\frac{\beta^2}{l^2}$ folgt:

$$\begin{aligned}
-a_l^\dagger a_l+\frac{\beta^2}{l^2} &= -\left(-\frac{\partial}{\partial r}+\frac{l}{r}-\frac{\beta}{l}\right)\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{l}{r}-\frac{\beta}{l}\right)+\frac{\beta^2}{l^2}\\
&= \frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{\partial}{\partial r}\frac{l}{r}-\frac{\partial}{\partial r}\frac{\beta}{l}-\frac{l}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{l^2}{r^2}+\frac{l\beta}{rl}+\frac{\beta}{l}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\beta l}{lr}-\frac{\beta^2}{l^2}+\frac{\beta^2}{l^2}\\
&= \frac{\partial^2}{\partial r^2}+\underbrace{\frac{l}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{l}{r^2}}_{\frac{\partial}{\partial r}\frac{l}{r}}-\frac{\beta}{l}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{l^2}{r^2}-\frac{l}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\beta}{l}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{2\beta}{r}\\
&= \frac{\partial^2}{\partial r^2}-\frac{l+l^2}{r^2}+\frac{2\beta}{r}\\
&= \frac{\partial^2}{\partial r^2}-\frac{l(l+l)}{r^2}+\frac{2\beta}{r}\\
&= h_l
\end{aligned}$$

Für $h_l \overset{!}{=} -a_{l+1}a_{l+1}^\dagger + \frac{\beta^2}{(l+1)^2}$ folgt:

$$\begin{aligned}
-a_{l+1}a_{l+1}^\dagger + \frac{\beta^2}{(l+1)^2} &= -\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} - \frac{\beta}{l+1}\right)\left(-\frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} - \frac{\beta}{l+1}\right) + \frac{\beta^2}{(l+1)^2} \\
&= \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l+1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r^2} + \frac{\beta}{l+1}\frac{\partial}{\partial r}}_{-\frac{\partial}{\partial r}\left(-\frac{\partial}{\partial r}+\frac{l+1}{r}-\frac{\beta}{l+1}\right)} + \\
&+ \underbrace{\frac{l+1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{(l+1)^2}{r^2} + \frac{\beta}{r}}_{-\frac{l+1}{r}\left(-\frac{\partial}{\partial r}+\frac{l+1}{r}-\frac{\beta}{l+1}\right)} - \underbrace{\frac{\beta}{l+1}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\beta}{r} - \frac{\beta^2}{(l+1)^2}}_{\frac{\beta}{l+1}\left(-\frac{\partial}{\partial r}+\frac{l+1}{r}-\frac{\beta}{l+1}\right)} + \frac{\beta^2}{(l+1)^2} \\
&= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l+1}{r^2} - \frac{(l+1)^2}{r^2} + \frac{2\beta}{r} \\
&= \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{(l+1)^2 - l - 1}{r^2} + \frac{2\beta}{r} \\
&= \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+l)}{r^2} + \frac{2\beta}{r} \\
&= h_l
\end{aligned}$$

Die Gleichung 41 ist also erfüllt. q.e.d.

2.4 Teilaufgabe d)

Zu zeigen ist, dass $a_{l+1}^\dagger g_{\epsilon l}$ entweder 0 oder Eigenfunktion zu h_{l+1} mit Eigenwert ϵ ist. Es muss also folgende Eigenwertgleichung gelten:

$$h_{l+1}\left(a_{l+1}^\dagger g_{\epsilon l}\right) = \epsilon\left(a_{l+1}^\dagger g_{\epsilon l}\right) \tag{42}$$

Für $a_{l+1}^\dagger g_{\epsilon l} = 0$ ist diese Eigenwertsgleichung stets erfüllt. Für ungleich Null folgt mit der Ergebnissen aus den Teilaufgaben a) und c):

$$\begin{aligned}
h_{l+1}\left(a_{l+1}^\dagger g_{\epsilon l}\right) &\overset{c)}{=} \left(-a_{l+1}^\dagger a_{l+1} + \frac{\beta^2}{(l+1)^2}\right)\left(a_{l+1}^\dagger g_{\epsilon l}\right) && (43)\\
&= \left(-a_{l+1}^\dagger a_{l+1} a_{l+1}^\dagger + \frac{\beta^2}{(l+1)^2} a_{l+1}^\dagger\right) g_{\epsilon l} && (44)\\
&= a_{l+1}^\dagger\left(\left(-a_{l+1}a_{l+1}^\dagger + \frac{\beta^2}{(l+1)^2}\right) g_{\epsilon l}\right) && (45)\\
&\overset{c)}{=} a_{l+1}^\dagger\left(h_l g_{\epsilon l}\right) && (46)\\
&\overset{a)}{=} a_{l+1}^\dagger\left(\epsilon g_{\epsilon l}\right) && (47)\\
&= \epsilon\left(a_{l+1}^\dagger g_{\epsilon l}\right) && (48)
\end{aligned}$$

2.5 Teilaufgabe e)

$$\left\langle a_{l+1}^{\dagger} g_{\epsilon l} | a_{l+1}^{\dagger} g_{\epsilon l} \right\rangle \overset{\text{b)}}{=} \left\langle g_{\epsilon l} | a_{l+1} a_{l+1}^{\dagger} g_{\epsilon l} \right\rangle \tag{49}$$

$$\overset{\text{c)}}{=} \left\langle g_{\epsilon l} | \left(\frac{\beta^2}{(l+1)^2} - h_l \right) g_{\epsilon l} \right\rangle \tag{50}$$

$$= \frac{\beta^2}{(l+1)^2} \langle g_{\epsilon l} | g_{\epsilon l} \rangle - \left\langle g_{\epsilon l} | \underbrace{h_l g_{\epsilon l}}_{\epsilon g_{\epsilon l}} \right\rangle \tag{51}$$

$$= \left(\frac{\beta^2}{(l+1)^2} - \epsilon \right) \langle g_{\epsilon l} | g_{\epsilon l} \rangle \tag{52}$$

Auf Grund der Positivität der Norm ist sowohl $\left\langle a_{l+1}^{\dagger} g_{\epsilon l} | a_{l+1}^{\dagger} g_{\epsilon l} \right\rangle \geq 0$, als auch $\langle g_{\epsilon l} | g_{\epsilon l} \rangle \geq 0$. Damit muss gelten:

$$\tfrac{\beta^2}{(l+1)^2} - \epsilon \geq 0 \tag{53}$$

$$\Leftrightarrow \quad (l+1)^2 \leq \tfrac{\beta^2}{\epsilon} \tag{54}$$

Da nach Vorraussetung $\epsilon > 0$, weil $E < 0$, ist l noch oben beschränkt. Wir suchen also das größtmögliche l und bezeichnen es als $\bar{l}$:

$$(l+1)^2 = \frac{\beta^2}{\epsilon} \tag{55}$$

$$\Leftrightarrow \quad l^2 + 2l + 1 - \tfrac{\beta^2}{\epsilon} = 0 \tag{56}$$

$$\Leftrightarrow \quad \bar{l} = -1 \overset{(-)}{+} \sqrt{1 - 1 + \frac{\beta^2}{\epsilon}} \tag{57}$$

$$= \frac{\beta}{\sqrt{\epsilon}} - 1 \tag{58}$$

Mit diesem $\bar{l}$ folgt offensichtlich aus Gleichung 52 und der Positivität der Norm, dass $\left\langle a_{\bar{l}+1}^{\dagger} g_{\epsilon l} | a_{\bar{l}+1}^{\dagger} g_{\epsilon l} \right\rangle = 0$ gilt. Mit Gleichung 58, der Definitionen 16 und 17 von ϵ und β und der Substitution $n \equiv \bar{l} + 1$ lässt sich ein Ausdruck für die diskreten Bindungsenergien gewinnen:

$$\epsilon \overset{\text{Gl. 58}}{=} \frac{\beta^2}{\underbrace{(\bar{l}+1)}_{n \in \mathbb{N}}{}^2} = \frac{\beta^2}{n^2} \tag{59}$$

$$\begin{aligned}
E &\overset{\text{Def. 16}}{=} -\frac{\epsilon\hbar^2}{2m_e} && (60)\\
&= -\frac{\hbar^2\beta^2}{2nm_e} && (61)\\
&= -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2} && (62)
\end{aligned}$$

3 Aufgabe H7: Neutron im Gravitationsfeld

Gegeben sei folgende Schrödingergleichung im Ortsraum:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + (mgx - E)\psi(x) = 0 \tag{63}$$

3.1 Teilaufgabe a)

Es soll die Schrödingergleichung im Impulsraum angegeben werden. Dazu wird eine Fouriertransformation der Schrödingergleichung durchgeführt. Es gilt also:

$$\begin{aligned}
0 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + (mgx - E)\psi(x)\right) e^{-ikx} && (64)\\
&= \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi''(x)e^{-ikx}dx}_{=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\widetilde{\psi}(k)} + \int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)(mgx - E)e^{-ikx}dx && (65)\\
&= \frac{\hbar^2k^2}{2m}\widetilde{\psi}(k) + mg\int_{-\infty}^{\infty}x\psi(x)e^{-ikx}dx - E\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)e^{-ikx}dx && (66)\\
&= \frac{\hbar^2k^2}{2m}\widetilde{\psi}(k) - E\widetilde{\psi}(k) + mgi\int_{-\infty}^{\infty}dx\psi(x)\left(\frac{\partial}{\partial k}e^{-ikx}\right) && (67)\\
0 &= \left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} - E\right)\widetilde{\psi}(k) + mgi\widetilde{\psi}'(k) \text{ (Schrödingergleichung im Impulsraum)} && (68)
\end{aligned}$$

3.2 Teilaufgabe b)

Aus der Schrödingergleichung im Impulsraum lässt sich leicht ein Lösungsansatz für die Wellenfunktion $\widetilde{\psi}(k)$ erkennen:

$$\widetilde{\psi}(k) = \widetilde{\psi_0}e^{i\left(\frac{\hbar^2k^3}{6m^2g} - \frac{Ek}{mg}\right)} \tag{69}$$

Durch die Fourierrücktransformation kann nun ein integraler Ausdruck der Lösung im Ortsraum gewonnen werden:

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\widetilde{\psi_0}e^{i\left(\frac{\hbar^2k^3}{6m^2g}-\frac{Ek}{mg}\right)}e^{ikx} \tag{70}$$

$$= \frac{1}{2\pi}\widetilde{\psi_0}\int_{-\infty}^{\infty} dke^{i\left(k^3\frac{\hbar^2}{6m^2g}+k\left(x-\frac{E}{mg}\right)\right)} \tag{71}$$

3.3 Teilaufgabe c)

Als Randbedingung bei $x = 0$ muss wegen $V(0) = \infty$ gelten: $\psi(0) = 0$. Es folgt also:

$$\psi(0) = 0 = \frac{1}{2\pi}\widetilde{\psi_0}\int_{-\infty}^{\infty} dke^{i\left(k^3\frac{\hbar^2}{6m^2g}-k\frac{E}{mg}\right)} \tag{72}$$

Die Nullstellen der obigen Funktion lässen sich nun auf die Nullstellen der Airy-Funktion zurückführen, wenn die obige Funktion die Gestalt der Airy-Funktion annimmt. Die Airy-Funktion hat die folgende Gestalt:

$$\mathrm{Ai}(z) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dt\cos\left(\frac{t^3}{3}+tz\right) \tag{73}$$

Die Gleichung 72 lässt sich durch folgende Substitutionen in die Airy-Funktion überführen:

$$t^3 \equiv \frac{k^3\hbar^2}{2m^g} \tag{74}$$

$$\Leftrightarrow t = k\sqrt[3]{\frac{\hbar^2}{2m^2g}} \tag{75}$$

$$tz \equiv -\frac{Ek}{mg} \tag{76}$$

$$\Leftrightarrow z \overset{\text{Gl. 75}}{\equiv} -E\sqrt[3]{\frac{2}{\hbar^2mg^2}} \tag{77}$$

$$dt \equiv dk\sqrt[3]{\frac{\hbar^2}{2m^2g}} \tag{78}$$

Für die Gleichung 72 folgt mit den obigen Substitutionen schließlich:

$$0 = \frac{1}{2\pi}\frac{\widetilde{\psi_0}}{\sqrt[3]{\frac{2}{\hbar^2mg^2}}}\int_{-\infty}^{\infty} dte^{i\left(\frac{t^3}{3}+tz\right)} \tag{79}$$

$$0 = \frac{1}{2\pi}\frac{\widetilde{\psi_0}}{\sqrt[3]{\frac{2}{\hbar^2mg^2}}}\int_{-\infty}^{\infty} dt\cos\left(\frac{t^3}{3}+tz\right)+i\sin\left(\frac{t^3}{3}+tz\right) \tag{80}$$

Nach dem Teilen der konstanten Vorfaktoren und der Tatsache, dass das Integrieren ungerader Funktionen, wie hier die sin-Funktion, über ein symmetrisches Intervall stets Null ergibt, folgt:

$$0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \cos\left(\frac{t^3}{3} + tz\right) \tag{81}$$

z muss also eine Nullstelle von Ai(z) sein! Damit folgt mit Gleichung 77 und $\{z_n | z \in \mathbb{N}\}$ der Menge der Nullstellen für die Energien E_n:

$$E_n = -z_n \sqrt[3]{\frac{\hbar^2 m g^2}{2}} \tag{82}$$

3.4 Teilaufgabe d)

Die Grundzustandsenergie E_0 ergibt sich nun mittels der Gleichung 82 und der Nullstelle $z_0 = -2.338$ zu:

$$\begin{aligned} E_0 &= 2.338 \sqrt[3]{\frac{(1.0546 \cdot 10^{-34}\mathrm{Js})^2 \cdot 1.6749 \cdot 10^{-27}\mathrm{kg} \cdot (9.81\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}^2})^2}{2}} \cdot \frac{1}{1.602} \cdot 10^{19} & (83) \\ &= 1.4071 \cdot 10^{-12}\ \mathrm{eV} & (84) \end{aligned}$$