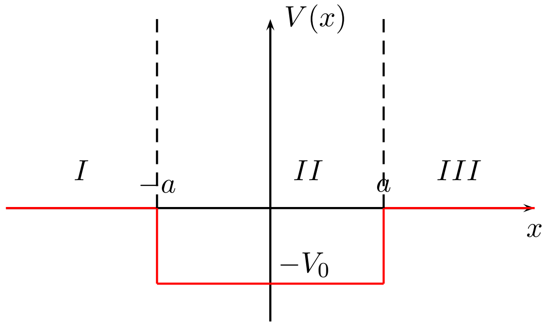
Heiko Dumlich, Max Hoffmann 5. November 2006

3 Übungsblatt Theoretische Physik IV

3.1 (Potentialtopf)

Wir betrachten den eindimensionalen Potentialtopf ($V_0 > 0$) mit:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & bei\ |x| \leq a \\ 0 & sonst \end{cases}$$



a)+b)

Es sind die gebundenen, normierten Energieeigenfunktionen zu bestimmen. Das bedeutet, wir können davon ausgehen, dass $E < -V_0$, das heisst aber auch, da $-V_0 < 0$, dass $E < 0 \Rightarrow E = -|E| < 0$ ist. Wir betrachten zuerst die drei Bereiche, wobei für die Wellenfunktionen folgt (in I entfällt der $e^{-\kappa x}$-Term, da die Wellenfunktion im Unendlichen verschwinden muss, daher verschwindet auch der $e^{\kappa x}$-Term in III):

$$\begin{aligned} \varphi_I(x) &= A\, e^{\kappa x}, \\ \varphi_{II}(x) &= C\, e^{ikx} + D\, e^{-ikx}, \\ \varphi_{III}(x) &= E\, e^{-\kappa x}, \end{aligned}$$

wobei die Schrödingergleichung gegeben ist mit:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + V(x)\,\varphi(x) = E\varphi(x).$$

Somit folgen die SGs:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2}\varphi_{II}(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(V_0 - |E|\right)\varphi_{II}(x) &= 0, \\ \frac{d^2}{dx^2}\varphi_{I,III}(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi_{I,III}(x) &= 0, \end{aligned}$$

wir definieren zudem die Konstanten $\kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$ und $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(V_0 - |E|\right)}$. Nun benutzen wir die Randbedingungen, dass wir am Rand einen stetigen Übergang der Wellenfunktionen haben und zudem auch die ersten Ableitungen überall stetig und endlich sind:

$$\begin{array}{ll} \varphi_I(-a) = \varphi_{II}(-a) & \varphi_{II}(a) = \varphi_{III}(a) \\ \varphi_I'(-a) = \varphi_{II}'(-a) & \varphi_{II}'(a) = \varphi_{III}'(a) \end{array}$$

Wir erhalten somit die vier Gleichungen mit vier zu bestimmenden Koeffizienten:

$$\begin{aligned} A\,e^{-\kappa a} &= C\,e^{-ika} + D\,e^{ika}, \\ E\,e^{-\kappa a} &= C\,e^{ika} + D\,e^{-ika}, \\ \kappa\,A\,e^{-\kappa a} &= ik\,C\,e^{-ika} - ik\,D\,e^{ika}, \\ -\kappa\,E\,e^{-\kappa a} &= ik\,C\,e^{ika} - ik\,D\,e^{-ika}. \end{aligned}$$

Nun können wir noch die Symmetrie ausnutzen, wobei wir für die gerade Parität finden:

$$A = E = \alpha \,\text{und}\, C = D = \gamma,$$

aus:

$$\begin{aligned} (A+E)\;e^{-\kappa a} &= (C+D)\;e^{-ika} + (C+D)\;e^{ika} \\ \kappa\;(A+E)\;e^{-\kappa a} &= ik\;(C+D)\;e^{-ika} - ik\;(C+D)\;e^{ika}, \end{aligned}$$

somit folgt:

$$\begin{aligned} \alpha\,e^{-\kappa a} &= \gamma\,\left(e^{-ika} + e^{ika}\right), \\ \kappa\,\alpha\,e^{-\kappa a} &= ik\,\gamma\,\left(e^{-ika} - e^{ika}\right), \end{aligned}$$

wobei nun Teilen der zweiten durch die erste Gleichung:

$$\kappa = \frac{ik\left(e^{-ika} - e^{ika}\right)}{\left(e^{-ika} + e^{ika}\right)},$$

liefert. Mit der eulerschen Identität $\left(e^{ix} = \cos x + i \sin x\right)$ können wir umformen zu:

$$\kappa = \frac{ik\left(-2i\,\sin(ka)\right)}{2\cos(ka)},$$

umstellen führt zu:

$$\kappa = k \tan(ka)\,. \tag{1}$$

Für α können wir aus umstellen:

$$\alpha = 2\gamma\,\cos(ka)\; e^{\kappa a} \Leftrightarrow \gamma = \alpha \frac{e^{-\kappa a}}{2\,\cos(ka)},$$

erhalten. Somit folgt für die Wellenfunktion:

$$\varphi_s(x) = \alpha \begin{cases} e^{\kappa x} & -a > x \\ \frac{e^{-\kappa a}}{\cos(ka)}\,\cos(kx) & -a < x < a \\ e^{-\kappa x} & x > a \end{cases}$$

wobei $\left(e^{-ikx} + e^{ikx}\right) = 2\,\cos(kx)$ benutzt wurde.
Mit Hilfe der Normierung können wir α und γ bestimmen, es folgt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\; |\varphi_s(x)|^2 = 1.$$

Wir müssen das Integral in drei Teile Spalten, da für die verschiedenen Gebiete verschiedene Wellenfunktionen gelten:

$$\int_{-\infty}^{-a} dx\; |\varphi_{s,I}(x)|^2 + \int_{-a}^{a} dx\; |\varphi_{s,II}(x)|^2 + \int_{a}^{\infty} dx\; |\varphi_{s,III}(x)|^2 = 1.$$

Die Berechnung ergibt:

$$\begin{aligned}
\alpha^2 \int_{-\infty}^{-a} dx\, e^{2\kappa x} + \alpha^2 \int_{-a}^{a} dx \left| \frac{e^{-\kappa a}}{\cos(ka)}\,\cos(kx) \right|^2 + \alpha^2 \int_{a}^{\infty} dx\, e^{-2\kappa x} &= 1, \\
\alpha^2 \left(\frac{1}{2\kappa} e^{2\kappa x}|_{-\infty}^{-a} + \frac{e^{-2\kappa a}}{\cos^2(ka)} \int_{-a}^{a} dx\, \cos^2(kx) - \frac{1}{2\kappa} e^{-2\kappa x}|_{a}^{\infty} \right) &= 1, \\
\alpha^2 \left(\frac{1}{2\kappa} e^{-2\kappa a} + \frac{e^{-2\kappa a}}{\cos^2(ka)} \int_{-a}^{a} dx\, \cos^2(kx) + \frac{1}{2\kappa} e^{-2\kappa a} \right) &= 1, \\
\alpha^2 \left[\frac{1}{\kappa} e^{-2\kappa a} + \left(\frac{e^{-2\kappa a}}{\cos^2(ka)} \right) \left(\frac{x}{2} + \frac{\sin(kx)\cos(kx)}{2k} \right) |_{-a}^{a} \right] &= 1, \\
\alpha^2 \left[\frac{1}{\kappa} e^{-2\kappa a} + \left(\frac{e^{-2\kappa a}}{\cos^2(ka)} \right) \left(a + \frac{\sin(ka)\cos(ka)}{k} \right) \right] &= 1, \\
e^{\kappa a} \left(\frac{1}{\kappa} + \frac{a}{\cos^2(ka)} + \frac{\sin(ka)\cos(ka)}{k\cos^2(ka)} \right)^{-\frac{1}{2}} &= \alpha,
\end{aligned}$$

Mit dem Integral:

$$\begin{aligned}
\int_{-a}^{a} dx\, \cos^2(kx) &= \int_{-a}^{a} dx\, \left(1 - \sin^2(kx)\right) = 2a + \frac{2\sin(ka)\cos(ka)}{k} - \int_{-a}^{a} dx\, \cos^2(kx), \\
\Rightarrow \int_{-a}^{a} dx\, \cos^2(kx) &= a + \frac{\sin(ka)\cos(ka)}{k}.
\end{aligned}$$

Somit folgt also für die Koeffizienten ohne Trigonometrische Funktionen mit der Vereinfachung:

$$1+\tan^2(ka)=\frac{1}{\cos^2(ka)} \Leftrightarrow 1+\frac{\kappa^2}{k^2}=\frac{1}{\cos^2(ka)},$$

$$\frac{1}{1+\frac{\kappa^2}{k^2}}=\cos^2(ka) \Rightarrow \frac{\frac{\kappa^2}{k^2}}{1+\frac{\kappa^2}{k^2}}=\sin^2(ka)$$

$$\alpha=e^{\kappa a}\left(\frac{1}{\kappa}+a\left(1+\frac{\kappa^2}{k^2}\right)+\frac{\frac{\frac{\kappa}{k}}{1+\frac{\kappa^2}{k^2}}\left(1+\frac{\kappa^2}{k^2}\right)}{k}\right)^{-\frac{1}{2}}=e^{\kappa a}\left(\frac{1}{\kappa}+a+a\frac{\kappa^2}{k^2}+\frac{\kappa}{k^2}\right)^{-\frac{1}{2}}$$

und

$$\gamma=\frac{1}{2}\left[\left(1+\frac{\kappa^2}{k^2}\right)\left(\frac{1}{\kappa}+a+a\frac{\kappa^2}{k^2}+\frac{\kappa}{k^2}\right)\right]^{-\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}\left[\frac{1}{\kappa}+a+2a\frac{\kappa^2}{k^2}+2\frac{\kappa}{k^2}+\frac{\kappa^3}{k^4}+a\frac{\kappa^4}{k^4}\right]^{-\frac{1}{2}}$$

Betrachten wir nun den Fall von ungeraden Paritäten, d.h. $\varphi(-x)=-\varphi(x)$:

$$A=-E=\epsilon\,\text{und}\,C=-D=\delta,$$

einsetzen liefert:

$$\begin{aligned}\epsilon\, e^{-\kappa a} &= \delta\, e^{-ika}-\delta\, e^{ika},\\ \kappa\,\epsilon\, e^{-\kappa a} &= ik\,\delta\, e^{-ika}+ik\,\delta\, e^{ika},\end{aligned}$$

diesmal liefert Teilen der 2. durch die 1. Gleichung:

$$\begin{aligned}\kappa &= ik\left(\frac{e^{-ika}+e^{ika}}{e^{-ika}-e^{ika}}\right),\\ \kappa &= ik\left(\frac{2\cos(ka)}{-2i\sin(ka)}\right),\\ \kappa &= -k\cot(ka).\end{aligned}$$

Wir können die Koeffizienten wieder durcheinander ausdrücken:

$$\delta=\epsilon\, e^{-\kappa a}\left(e^{-ika}-e^{ika}\right)^{-1},$$

somit folgt:

$$
\begin{aligned}
\varphi_{II}(x) &= \delta\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right) = \epsilon\, e^{-\kappa a}\left(e^{-ika} - e^{ika}\right)^{-1}\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right), \\
&= \epsilon\, e^{-\kappa a}\frac{1}{-2i\,\sin(ka)}\,2i\,\sin(kx) = A\, e^{-\kappa a}\frac{-1}{\sin(ka)}\,\sin(kx)
\end{aligned}
$$

Die antisymmetrische Wellenfunktion lautet also:

$$
\varphi_a(x) = \epsilon\begin{cases} e^{\kappa x} & -a > x \\ \frac{-e^{-\kappa a}}{\sin(ka)}\,\sin(kx) & -a < x < a \\ -e^{-\kappa x} & x > a \end{cases}
$$

Die Normierung liefert also:

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dx\; |\varphi_a(x)|^2 &= 1, \\
\int_{-\infty}^{-a} dx\; |\varphi_{a,I}(x)|^2 + \int_{-a}^{a} dx\; |\varphi_{a,II}(x)|^2 + \int_{a}^{\infty} dx\; |\varphi_{a,III}(x)|^2 &= 1, \\
\epsilon^2\left[\frac{e^{2\kappa x}}{2\kappa}|_{-\infty}^{-a} + \frac{e^{-2\kappa a}}{\sin^2(ka)}\int_{-a}^{a} dx\,\sin^2(kx) - \frac{e^{-2\kappa x}}{2\kappa}|_{a}^{\infty}\right] &= 1, \\
\epsilon^2\left[\frac{e^{-2\kappa a}}{\kappa} + \frac{e^{-2\kappa a}}{\sin^2(ka)}\left(a - \frac{\sin(ka)\cos(ka)}{k}\right)\right] &= 1, \\
e^{-2\kappa a}\left[\frac{1}{\kappa} + \frac{1}{\sin^2(ka)}\left(a - \frac{\sin(ka)\cos(ka)}{k}\right)\right] &= \epsilon^{-2}, \\
e^{\kappa a}\left(\frac{1}{\kappa} + \frac{a}{\sin^2(ka)} - \frac{\sin(ka)\cos(ka)}{\sin^2(ka)\,k}\right)^{-\frac{1}{2}} &= \epsilon.
\end{aligned}
$$

Wir können nun sehen, dass die beiden Paritäten das gleiche Ergebnis für die Koeffizienten A liefern. Hierzu nutzen wir die Beziehungen:

$$
1 + \cot^2(ka) = \frac{1}{\sin^2(ka)} \Leftrightarrow 1 + \frac{\kappa^2}{k^2} = \frac{1}{\sin^2(ka)},
$$

um die Trigonometrischen Funktionen zu entfernen:

$$
\epsilon = e^{\kappa a}\left(\frac{1}{\kappa} + a\left(1 + \frac{\kappa^2}{k^2}\right) - \frac{\cos(ka)}{\sin(ka)\,k}\right)^{-\frac{1}{2}} = e^{\kappa a}\left(\frac{1}{\kappa} + a + a\frac{\kappa^2}{k^2} - \frac{\cot(ka)}{k}\right)^{-\frac{1}{2}},
$$

$$
\epsilon = e^{\kappa a}\left(\frac{1}{\kappa} + a + a\frac{\kappa^2}{k^2} + \frac{\kappa}{k^2}\right)^{-\frac{1}{2}}.
$$

wobei wir ausgenutzt haben, dass $-\cot(ka) = \frac{\kappa}{k}$. Somit ist $\alpha = \epsilon$. Um die Energieeigenwerte zu finden, betrachten wir unsere beiden Bedingungen:

$$
\begin{aligned}
\kappa &= k\tan(ka)\,, \\
\kappa &= -k\cot(ka)\,.
\end{aligned}
$$

Somit folgt also:

$$\tan(ka) = -\cot(ka)\,.$$

Wobei allgemein $\tan\left(x + \frac{\pi}{2}\right) = -\cot(x)$ gilt. Somit kann man auch schreiben:

$$\kappa = k\tan\left(ka + \frac{n\pi}{2}\right),$$

mit $n \in \mathbb{N}$. Für gerade n erhalten wir dann den tan-Ausdruck, während ungerade n den ungeraden cot Ausdruck liefern. Um die Gleichungen nun auszuwerten, betrachten wir κa und ka, wobei diese beide von der Energie und der Breite des Potentialtopfes a abhängen:

$$
\begin{aligned}
\kappa^2 a^2 &= \frac{2ma^2\,|E|}{\hbar^2}, \\
k^2 a^2 &= \frac{2ma^2}{\hbar^2}\left(V_0 - |E|\right).
\end{aligned}
$$

Wohingegen die Summe dieser beiden von der Energie unabhängig ist:

$$k^2a^2 + \kappa^2 a^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}.$$

Wir können somit, da diese Formel die Form $x^2 + y^2 = R^2$, besitzt Kreise um den Ursprung mit dem Radius $R = \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}}$ konstruieren, hierbei ist also der Radius R von $\sqrt{V_0}a$ abhängig. Wobei wir gleichzeitig die Bedingungen betrachten:

$$
\begin{aligned}
\kappa a &= ka\tan(ka)\,, \\
\kappa a &= -ka\cot(ka)\,.
\end{aligned}
$$

Wir plotten also κa über ka, die Schnittpunkte stellen die möglichen Lösungen der transzendenten Gleichungen dar (qualitativer Plot im Anhang). Dies liefert eine Bedingung für die Energieeigenwerte, denn wenn n die Anzahl der Schnittpunkte angibt, die der Anzahl der Energieeigenwerten gleich ist, dann können wir aus dem Graphen ablesen, dass die Anzahl vom Radius R in folgender Weise abhängt:

$$(n-1)\frac{\pi}{2} < R < \frac{n\pi}{2}, \tag{2}$$

(Zum Beispiel für $n = 1$ folgt $0 < R < \frac{\pi}{2}$ und für $n = 2$ folgt $\frac{\pi}{2} < R < \pi$, die Graphik zeigt uns, dass der Radius tatsächlich in diesem Bereich liegen muss, würde $R > \pi$ sein, hätte es nach der Graphik min. 3 Lösungen)

Somit folgt aber auch für die Energieeigenwerte, die wie man durch die Graphik erkennt, endlicher Anzahl sind (wir betrachten die ka-Achse, wobei in jedem $\frac{n\pi}{2}$-Bereich ein Energieeigenwert liegt):

$$\begin{aligned} ka &= \frac{n\pi}{2}, \\ \frac{2ma^2}{\hbar^2}\left(V_0 - |E_n|\right) &= \frac{n^2\pi^2}{4}, \\ -|E_n| &= \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2} - V_0, \\ E_n &= \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{2}\right)^2 \cdot \frac{1}{a^2} - V_0. \end{aligned}$$

Es fällt zudem auf, dass es in jedem symmetrischen Fall Energieeigenwerte gibt, während für den asymmetrischen Fall eine Barriere überschritten werden muss. Diese liegt, wie man aus der Graphik erkennen kann bei $R \geq \frac{\pi}{2}$. Somit folgt

$$\frac{\pi^2\hbar^2}{8m} \leq V_0 a^2,$$

damit man auch mindestens einen antisymmetrischen Energieeigenwert erhält.

Wir können nun die Anzahl der gebundenen Zustände aus unserer Bedingung (2) bestimmen:

$$(n-1) < R\frac{2}{\pi} < n,$$

somit folgt also:

$$n = \left\lfloor \frac{2R}{\pi} \right\rfloor,$$

wobei wir für die Anzahl n aufrunden auf die nächste ganze Zahl. Schließlich können wir auch zwischen ungeraden und geraden gebundenen Zuständen unterscheiden, wobei wir gerade mit dem Index s (symmetrisch) und ungerade mit dem Index a (antisymmetrisch) bezeichnen und aus unserem Graphen die Bedingungen heraus finden können:

$$(n_s - 1)\,\pi < R < n_s\pi,$$

$$n_a\pi - \frac{\pi}{2} < R < n_a\pi + \frac{\pi}{2}.$$

Mit diesen finden wir für die Anzahl der Zustände:

$$n_s = \left\lfloor \frac{R}{\pi} \right\rfloor \text{ und } n_a = \left\lfloor \frac{R}{\pi} - \frac{1}{2} \right\rfloor.$$

Setzen wir R ein, so folgt:

$$n_s = \left\lfloor \frac{\sqrt{2mV_0}a}{\pi\hbar} \right\rfloor \text{ und } n_a = \left\lfloor \frac{\sqrt{2mV_0}a}{\pi\hbar} - \frac{1}{2} \right\rfloor .$$

Qualitativ lässt sich über die Energieeigenwerte sagen, dass egal für welches R es symmetrische gibt, jedoch erst ab der Schwelle $R \geq \frac{\pi}{2}$ antisymmetrische zu finden sind. Zudem ist ihre Anzahl beschränkt, die Anzahl ergibt sich in Abhängigkeit von der Tiefe des Potentials V_0 und der Breite a.

c)

Wir betrachten nun das attraktive δ-Potential, wobei zu beachten ist, dass die "Fläche", die durch V_0 und $2 \cdot a$ aufgespannt wird konstant bleiben muss. Der Grenzübergang kann erreicht werden, indem wir $a \to 0$ gehen lassen und gleichzeitig $V_0 \to \infty$ laufen lassen. Für das Potential soll gelten:

$$V(x) = -C\,\delta(x) .$$

Wir definieren

$$V_{a\to 0}(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| \leq a \\ 0 & sonst \end{cases}$$

mit $a \to 0$.

Für den Grenzübergang muss folgen:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, V_{a\to 0}(x) &= -C \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(x) , \\ 2aV_0 &= C. \end{aligned}$$

Nun gehen wir in unsere Bedingungsgleichung aus Aufgabenteil a)+b) (1) ein:

$$\kappa = k \tan(ka) ,$$

wir setzen die Terme für κ und k ein und nutzen die Näherung für kleine Winkel, wobei $a \to 0$, d.h. wir können die Taylorreihe des Tangens nutzen, wobei $\tan(ka) \approx ka$:

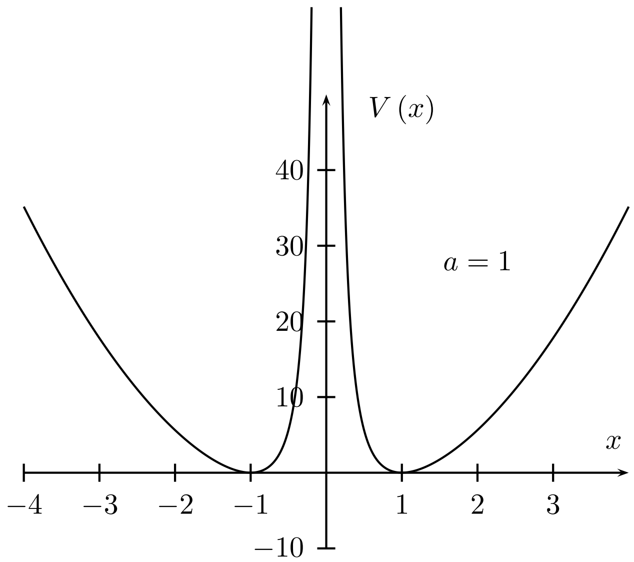
$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} &= \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|)\,a, \\ \frac{2m}{\hbar^2}|E| &= \frac{4m^2}{\hbar^4}(V_0 - |E|)^2 a^2, \\ |E| &= \frac{2ma^2V_0^2}{\hbar^2} - \frac{2ma^2}{\hbar^2}V_0|E| + \frac{2ma^2}{\hbar^2}E^2. \end{aligned}$$

Wir wissen, dass $2aV_0 = C = konst. \neq 0$ ist, wobei $a \to 0$, dies liegt daran, dass V_0 sehr groß wird, jedoch folgt somit für die Terme, in denen a und V_0 nicht in der gleichen Potenz auftreten, dass sie gegen 0 gehen müssen, somit vereinfacht sich der Term zu:

$$E = -\frac{2ma^2V_0^2}{\hbar^2} = -\frac{mC^2}{2\hbar^2}$$

Es gibt in diesem Fall also nur einen gebundenen Zustand, dieser lautet $E = -\frac{mC^2}{2\hbar^2}$.

3.2 (Sommerfeldsche Polynommethode)



a)

Das Potential wird beschrieben durch

$$V(x) = V_0 \left(\frac{x}{a} - \frac{a}{x} \right)^2 = V_0 \left(\frac{x^2}{a^2} - 2 + \frac{a^2}{x^2} \right)$$

mit der SCHRÖDINGER-Gleichung für stationäre Zustände eines Teilchens mit Masse m im Potential V

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + V_0 \left(\frac{x^2}{a^2} - 2 + \frac{a^2}{x^2} \right) \psi \quad = \quad E\psi$$

oder ausgeschrieben:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi - \frac{2mV_0x^2}{\hbar^2a^2}\psi - \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2x^2}\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(2V_0 + E) = 0$$

Um die SOMMERFELDSCHE Polynommethode anzuwenden, sind Näherungen für $x \to \infty$ und für $x \to 0$ zu finden. Für ersteres gilt

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi = \frac{2mV_0x^2}{\hbar^2a^2}\psi.$$

Für diese Differentialgleichung ist standardmäßig der Ansatz:

$$\begin{aligned}
\psi &= e^{-\frac{x^2}{2}\alpha} \\
\frac{d}{dx}\psi &= -x\alpha e^{-\frac{x^2}{2}\alpha} \\
\frac{d^2}{dx^2}\psi &= \left(-\alpha + (x\alpha)^2\right) e^{-\frac{x^2}{2}\alpha}
\end{aligned}$$

zu wählen, wobei wegen des stärkeren Wachstum $\frac{d^2\psi}{dx^2} = x^2a^2e^{-\frac{x^2}{2}\alpha}$ gewählt wird. Das ergibt für

$$\alpha = \pm\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2a^2}}.$$

Da die Wellenfunktion normierbar sein muss, sollte auch die Näherung für $x \to \infty$ gegen null streben. Daher wähle man

$$\psi_\infty\left(x\right) = \exp\left(-\frac{x^2}{2}\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2a^2}}\right).$$

Die andere Näherung ist für $x \to 0$ zu finden. Dort gilt

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2x^2}\psi$$

wofür folgender Ansatz geeignet ist:

$$\begin{aligned}
\psi &= x^\alpha \\
\frac{d}{dx}\psi &= \alpha x^{\alpha-1} \\
\frac{d^2}{dx^2}\psi &= \alpha\left(\alpha-1\right)x^{\alpha-2}.
\end{aligned}$$

Es folgt

$$\alpha^2 - \alpha - \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2x^2}x^2 = 0$$

$$\Rightarrow \alpha = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}}.$$

Auch hier gilt wieder, dass die Funktion normierbar sein muss. Das heißt der Exponent sollte nicht negativ sein (für $x \to 0$ muss der Exponent positiv sein, wäre er negativ, also $\frac{1}{x^\alpha}$, $\alpha \in \mathbb{R}^+$ würde die Wellenfunktion divergieren) und daher

$$\psi_0 = x^{\frac{1}{2}+\sqrt{\frac{1}{4}+\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}}}.$$

Bevor mit diesen Ansätzen weitergerechnet wird, empfielt es ich drei Abkürzungen einzuführen:

$$
\begin{aligned}
q &= \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2 a^2}} \qquad [q] = \frac{1}{m^2} \\
w &= \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}} \qquad [w] = 1 \\
\lambda &= \frac{2m}{\hbar^2}(2V_0 + E) \qquad [\lambda] = m^2.
\end{aligned}
$$

Ferner gilt dann

$$w^2 = w + q^2 a^4 \tag{3}$$

und für die Substitution $\xi = x^2\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2 a^2}} = qx^2$ gilt

$$
\begin{aligned}
d\xi &= 2qxdx \Leftrightarrow \frac{dx}{d\xi} = \frac{1}{2qx}, \\
\frac{d}{dx} &= \frac{d}{d\xi}\frac{d\xi}{dx} = 2qx\frac{d}{d\xi}, \\
\frac{d^2}{dx^2} &= 2qx\frac{d}{d\xi}\left(2qx\frac{d}{d\xi}\right) = 4q^2x\frac{d}{d\xi}\left(x\frac{d}{d\xi}\right), \\
&= 4q^2x\frac{dx}{d\xi}\frac{d}{d\xi} + 4q^2x^2\frac{d^2}{d\xi^2}, \\
&= 2q\frac{d}{d\xi} + 4q\xi\frac{d^2}{d\xi^2}.
\end{aligned}
$$

b)

Mit diesen Abkürzungen gestärkt lautet der Produktansatz nun

$$
\begin{aligned}
\psi(x) &= \psi_\infty(x)\,\psi_0(x)\,\phi(x) \\
&= e^{-\frac{x^2}{2}q}x^w\phi(x),
\end{aligned}
$$

wobei $\phi(x)$ die noch zu bestimmende Restfunktion ist.

In der Schrödingergleichung wird die 2. Ableitung von ψ benötigt:

$$
\begin{aligned}
\psi' &= \psi'_\infty(x)\,\psi_0(x)\,\phi(x) + \psi_\infty(x)\,\psi'_0(x)\,\phi(x) + \psi_\infty(x)\,\psi_0(x)\,\phi'(x) \\
&= -xqe^{-\frac{x^2}{2}q}x^w\phi(x) + e^{-\frac{x^2}{2}q}wx^{w-1}\phi(x) + e^{-\frac{x^2}{2}q}x^w\phi'(x) \\
&= \psi\underbrace{\left(-xq + \frac{w}{x} + \frac{\phi'}{\phi}\right)}_{(*)} = \psi(*)
\end{aligned}
$$

$$\psi'' = (\psi(*))' = \psi'(*) + \psi(*)' = \psi\left((*)^2 + (*)'\right)$$

wobei

$$(*)' = -q - \frac{w}{x^2} + \frac{1}{\phi}\frac{d^2\phi}{dx^2} - \left(\frac{1}{\phi}\frac{d\phi}{dx}\right)^2$$

und

$$(*)^2 = \frac{w^2}{x^2} + x^2q^2 + \left(\frac{1}{\phi}\frac{d\phi}{dx}\right)^2 - 2qw + \frac{2w}{x\phi}\frac{d\phi}{dx} - 2\frac{xq}{\phi}\frac{d\phi}{dx}.$$

Die Schrödinger-Gleichung lautet jetzt:

$$(*)^2 + (*)' - \frac{q^2a^4}{x^2} - x^2q^2 + \lambda = 0$$

und eingesetzt:

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{w^2}{x^2} + x^2q^2 + \left(\frac{1}{\phi}\frac{d\phi}{dx}\right)^2 - 2qw + \frac{2w}{x\phi}\frac{d\phi}{dx} - 2\frac{xq}{\phi}\frac{d\phi}{dx} \\
&- q - \frac{w}{x^2} + \frac{1}{\phi}\frac{d^2\phi}{dx^2} - \left(\frac{1}{\phi}\frac{d\phi}{dx}\right)^2 \\
&- \frac{q^2a^4}{x^2} - x^2q^2 + \lambda \\
&= \frac{w^2 - \left(w + q^2a^4\right)}{x^2} - 2qw + \frac{2w}{x\phi}\frac{d\phi}{dx} - 2\frac{xq}{\phi}\frac{d\phi}{dx} - q + \frac{1}{\phi}\frac{d^2\phi}{dx^2} + \lambda \\
&= -2qw + \frac{2w}{x\phi}\frac{d\phi}{dx} - \frac{2xq}{\phi}\frac{d\phi}{dx} - q + \frac{1}{\phi}\frac{d^2\phi}{dx^2} + \lambda.
\end{aligned}$$

In der vorletzten Zeile haben wir Gleichung (3) ausgenutzt. Multipliziert man die Gleichung mit $\frac{\phi}{q}$ erhält man:

$$\begin{aligned}
0 &= \phi\left(-2w - 1 + \frac{\lambda}{q}\right) + \left(\frac{2w}{qx} - 2x\right)\frac{d\phi}{dx} + \frac{1}{q}\frac{d^2\phi}{dx^2} \\
&= \phi\left(-2w - 1 + \frac{\lambda}{q}\right) + \left(\frac{2w}{qx} - 2x\right)2qx\frac{d\phi}{d\xi} + 2\frac{d\phi}{d\xi} + 4\xi\frac{d^2\phi}{d\xi^2}.
\end{aligned}$$

Substitution von $\xi = qx^2 \Leftrightarrow \frac{\xi}{q} = x^2$ liefert:

$$\begin{aligned}
\phi\left(-2w - 1 + \frac{\lambda}{q}\right) + \left(4w - 4qx^2 + 2\right)\frac{d\phi}{d\xi} + 4\xi\frac{d^2}{d\xi^2} &= 0 \\
-\underbrace{\left(2w + 1 - \frac{\lambda}{q}\right)}_{k}\phi + 2\left(2w - 2\xi + 1\right)\frac{d\phi}{d\xi} + 4\xi\frac{d^2}{d\xi^2} &= 0
\end{aligned}$$

als Differentialgleichung für ϕ.

c)

Für ϕ benutzt man einen Reihenansatz

$$\begin{aligned}\phi &= \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \xi^\nu \\ \phi' &= \sum_{\nu=1}^{\infty} a_\nu \nu \xi^{\nu-1} \\ \phi'' &= \sum_{\nu=2}^{\infty} a_\nu v\left(\nu-1\right) \xi^{\nu-2}\end{aligned}$$

welcher auf

$$\begin{aligned}-k\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \xi^\nu + 2\left(2w-2\xi+1\right)\sum_{\nu=1}^{\infty} a_\nu \nu \xi^{\nu-1} + 4\sum_{\nu=1}^{\infty} a_\nu \nu\left(\nu-1\right)\xi^{\nu-1} &= 0 \\ k\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \xi^\nu + \left(4w+2\right)\underbrace{\sum_{\nu=1}^{\infty} a_\nu \nu \xi^{\nu-1}}_{\nu\to\nu+1} - 4\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \nu \xi^\nu + 4\underbrace{\sum_{\nu=1}^{\infty} a_\nu \nu\left(\nu-1\right)\xi^{\nu-1}}_{\nu\to\nu+1} &= 0 \\ \sum_{\nu=0}^{\infty} \xi^\nu\left\{a_{\nu+1}\left(\nu+1\right)\left(4w+2+4\nu\right) + a_\nu\left(k-4\nu\right)\right\} &= 0\end{aligned}$$

führt.

Damit die Gleichung für beliebige ξ gilt, muss der Inhalt der $\{\}$-Klammer null werden. Um dies zu erfüllen, muss sich a_ν durch folgende Rekursionformel berechnen:

$$\begin{aligned}0 &= a_{\nu+1}\left(\nu+1\right)\left(4w+2+4\nu\right) + a_\nu\left(k-4\nu\right) \\ a_{\nu+1} &= a_\nu \frac{\left(4\nu-k\right)}{\left(\nu+1\right)\left(4w+2+4\nu\right)}.\end{aligned}$$

Die Koeffizientenreihe zeigt für große ν das gleiche Konvergenzverhalten wie e^ξ bzw. e^{ξ^2}. Eingesetzt in den Produktansatz ergibt sich dadurch immer noch ein divergentes Verhalten für die Wellenfunktion. Da dies der Vorraussetzung der Normierbarkeit widerspricht, muss die Koeffizientenstelle bei einem endlichen Term abbrechen:

$$4\nu - k = 0.$$

Daraus folgt eine Energie E_ν :

$$
\begin{aligned}
4\nu - \left(2w + 1 - \frac{\lambda}{q}\right) &= 0, \\
4\nu - \left(1 + 2\sqrt{\frac{1}{4} + \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}} + 1 - \frac{\frac{2m}{\hbar^2}\left(2V_0 + E\right)}{\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2 a^2}}}\right) &= 0, \\
4\nu - \left(2 + 2\sqrt{\frac{1}{4} + \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}} - \frac{\frac{2m}{\hbar^2}\left(2V_0 + E\right)}{\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2 a^2}}}\right) &= 0, \\
\frac{\hbar}{2a}\sqrt{\frac{V_0}{2m}}\left(1 - 2\nu + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}}\right) - 2V_0 &= E_\nu.
\end{aligned}
$$

Es ergeben sich die Energieeigenwerte:

$$
E_\nu = \frac{\hbar}{2a}\sqrt{\frac{V_0}{2m}}\left(1 - 2\nu + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}}\right) - 2V_0.
$$