Hochschule RheinMain
Prof. Dr. D. Lehmann WS 2022/23

Lösungen 12. Übungsblatt Quantenmechanik

Aufgabe 1: a) Wir haben

$$\begin{aligned} v(x) &= \sum_{k=0}^{\infty} a_k\, x^k \\ v'(x) &= \sum_{k=1}^{\infty} a_k\, k\, x^{k-1} \;=\; \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1}\,(k+1)\,x^k \\ v''(x) &= \sum_{k=2}^{\infty} a_k\, k(k-1)\, x^{k-2} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} x\,v'(x) &= \sum_{k=1}^{\infty} a_k\, k\, x^k \\ x\,v''(x) &= \sum_{k=2}^{\infty} a_k\, k(k-1)\, x^{k-1} \;=\; \sum_{k=1}^{\infty} a_{k+1}\,(k+1)k\, x^k \end{aligned}$$

Die Differentialgleichung (3) ist gegeben durch

$$x\,v'' \;-\; x\,v' \;+\; (2\ell+2)\,v' \;+\; \lambda\,v \;=\; 0$$

mit

$$\lambda \;=\; \tfrac{1}{\gamma} - \ell - 1$$

Wir bekommen

$$\sum_{k=1}^{\infty} a_{k+1}\,(k+1)k\,x^k \;-\; \sum_{k=1}^{\infty} a_k\,k\,x^k \;+\; (2\ell+2)\sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1}\,(k+1)\,x^k \;+\; \lambda\,\sum_{k=0}^{\infty} a_k\,x^k \;=\; 0$$

oder

$$\begin{aligned} &(2\ell+2)\,a_1\,(0+1) \;+\; \lambda\,a_0 \;+ \\ &\quad \sum_{k=1}^{\infty}\Big\{\, a_{k+1}\,(k+1)k \;-\; a_k\,k \;+\; (2\ell+2)a_{k+1}\,(k+1) \;+\; \lambda\,a_k \Big\}\, x^k \;=\; 0 \end{aligned}$$

Da die Funktionen $1, x, x^2, \cdots$ linear unabhängig sind, muss jeder Koeffizient vor einem x^k für sich gleich 0 sein:

$$(2\ell+2)\,a_1 \;+\; \lambda\,a_0 \;=\; 0$$

und für $k \geq 1$

$$\begin{aligned} a_{k+1}\,(k+1)k \;-\; a_k\,k \;+\; (2\ell+2)a_{k+1}\,(k+1) \;+\; \lambda\,a_k &= 0 \\ \Leftrightarrow \qquad a_{k+1}\,(k+1)\big[\,k \;+\; (2\ell+2)\,\big] \;-\; a_k\,(k \;-\; \lambda) &= 0 \end{aligned}$$

Also

$$a_1 \;=\; -\frac{\lambda}{2\ell+2}\,a_0$$

und für $k \geq 1$

$$a_{k+1} \;=\; \frac{k-\lambda}{(k+1)(k+2\ell+2)}\,a_k$$

Die letzte Gleichung reproduziert offensichtlich auch die erste Gleichung für das a_1, gilt also auch für $k = 0$.

b) Mit

$$v(x) \;=\; n!\,L_n^{(2\ell+1)}(x) \;=\; n!\,\sum_{k=0}^{n}\binom{n+2\ell+1}{n-k}\frac{(-x)^k}{k!}$$

haben wir offensichtlich

$$a_k \;=\; n!\,\binom{n+2\ell+1}{n-k}\frac{(-1)^k}{k!} \;=\; n!\,\frac{(2\ell+1+n)!}{(n-k)!\,(2\ell+1+k)!}\,\frac{(-1)^k}{k!}$$

und damit

$$\begin{aligned} \frac{a_{k+1}}{a_k} &= n!\,\frac{(2\ell+1+n)!}{(n-k-1)!\,(2\ell+2+k)!}\,\frac{(-1)^{k+1}}{(k+1)!} \times \frac{1}{n!}\,\frac{(n-k)!\,(2\ell+1+k)!}{(2\ell+1+n)!}\,\frac{k!}{(-1)^k} \\ &= \frac{1}{(n-k-1)!\,(2\ell+2+k)!}\,\frac{(-1)^1}{(k+1)} \times \frac{(n-k)!\,(2\ell+1+k)!}{1}\,\frac{1}{1} \\ &= \frac{1}{2\ell+2+k}\,\frac{-1}{k+1} \times \frac{n-k}{1} \;=\; \frac{k-n}{(k+1)(k+2\ell+2)} \end{aligned}$$

Für $\lambda = n$ stimmt das mit dem Ergebnis aus Teil (a) überein.

c) Wegen

$$\lim_{k\to\infty}\frac{k-\lambda}{k+2\ell+2} \;=\; 1$$

können wir für grosse k schreiben (für $\lambda \notin \mathbb{Z}$ ist $k-\lambda$ immer ungleich 0 und damit auch die a_k)

$$a_{k+1} \;\overset{k\to\infty}{\approx}\; \frac{1}{k+1}\,a_k$$

Also etwa für alle k grösser als ein hinreichend gross gewähltes k_0:

$$\begin{aligned} a_{k+1} \;&\approx\; \frac{1}{k+1}\, a_k \;\approx\; \frac{1}{(k+1)k}\, a_{k-1} \\ &\approx\; \frac{1}{(k+1)k(k-1)\cdots(k_0+1)}\, a_{k_0} \;=\; \frac{k_0!}{(k+1)!}\, a_{k_0} \;=:\; \frac{c}{(k+1)!} \end{aligned}$$

mit der Konstanten

$$c \;:=\; k_0!\, a_{k_0}$$

d) Mit Teil (c) bekommen wir

$$\begin{aligned} v(x) \;=\; \sum_{k=0}^{\infty} a_k\, x^k \;&=\; \sum_{k=0}^{k_0} a_k\, x^k \;+\; \sum_{k=k_0+1}^{\infty} a_k\, x^k \\ &\approx\; \sum_{k=0}^{k_0} a_k\, x^k \;+\; \sum_{k=k_0+1}^{\infty} \frac{c}{k!}\, x^k \\ &=\; \sum_{k=0}^{k_0} a_k\, x^k \;+\; \sum_{k=0}^{\infty} \frac{c}{k!}\, x^k \;-\; \sum_{k=0}^{k_0} \frac{c}{k!}\, x^k \\ &=\; \sum_{k=0}^{k_0} \left[a_k \;-\; \frac{c}{k!} \right] x^k \;+\; c \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} \\ &=\; \sum_{k=0}^{k_0} b_k\, x^k \;+\; c\, e^x \end{aligned}$$

mit den Koeffizienten $b_k := a_k - c/k!$. Wegen

$$\begin{aligned} u_\ell(r) \;&=\; v_\ell(x)\, x^{\ell+1}\, e^{-\frac{x}{2}} \\ x \;&=\; 2\,\gamma\,\rho \;=\; 2\,\gamma\, r/r_B \\ \gamma^2 \;&=\; -\varepsilon \;>\; 0 \end{aligned}$$

bekommen wir dann also

$$\begin{aligned} u_\ell(r) \;&\approx\; \left\{ \sum_{k=0}^{k_0} b_k\, x^k \;+\; c\, e^x \right\} x^{\ell+1}\, e^{-\frac{x}{2}} \\ &=\; \text{polynom} \times e^{-\frac{x}{2}} \;+\; c\, x^{\ell+1}\, e^{+\frac{x}{2}} \end{aligned}$$

und wegen des zweiten Terms ist das dann also nicht mehr quadratintegrabel.

Aufgabe 2: a) Mit

$$\psi(\xi) \;=\; v(\xi)\, e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

bekommen wir

$$\begin{aligned}
\psi'(\xi) &= v'(\xi)\, e^{-\frac{\xi^2}{2}} \;-\; v(\xi)\, \xi\, e^{-\frac{\xi^2}{2}} \\
\psi''(\xi) &= v''(\xi)\, e^{-\frac{\xi^2}{2}} \;-\; v'(\xi)\, \xi\, e^{-\frac{\xi^2}{2}} \;-\; v'(\xi)\, \xi\, e^{-\frac{\xi^2}{2}} \;-\; v(\xi)\, e^{-\frac{\xi^2}{2}} \;+\; v(\xi)\, \xi^2\, e^{-\frac{\xi^2}{2}} \\
&= v''(\xi)\, e^{-\frac{\xi^2}{2}} \;-\; 2\, v'(\xi)\, \xi\, e^{-\frac{\xi^2}{2}} \;+\; v(\xi)\, (\xi^2 - 1)\, e^{-\frac{\xi^2}{2}}
\end{aligned}$$

Also,

$$\begin{aligned}
\tfrac{1}{2}\Big\{ -\tfrac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \Big\}\, \psi &= \varepsilon\, \psi \\
\Leftrightarrow \qquad \psi'' \;-\; \xi^2\, \psi \;+\; 2\varepsilon\, \psi &= 0 \\
\Leftrightarrow \qquad v'' \;-\; 2\, v'\, \xi \;+\; (\xi^2 - 1) v \;-\; \xi^2\, v \;+\; 2\varepsilon\, v &= 0 \\
\Leftrightarrow \qquad v'' \;-\; 2\, \xi\, v' \;+\; (2\varepsilon - 1)\, v &= 0\ .
\end{aligned}$$

b) Das Theorem 5.3.3 war die folgende Aussage: Es sei $\sigma(x)$ ein Polynom vom Grad ≤ 2 und $\tau(x)$ ein Polynom vom Grad ≤ 1. Die DGL

$$\sigma(x)\, y'' \;+\; \tau(x)\, y' \;+\; \lambda\, y \;=\; 0 \tag{1}$$

heisst DGL vom hypergeometrischen Typ. Für

$$\lambda \;=\; \lambda_n \;:=\; -\,n\tau' \;-\; \tfrac{n(n-1)}{2}\, \sigma'' \tag{2}$$

erhält man Polynome als Lösungen, die sogenannten Polynome vom hypergeometrischen Typ. Sie lassen sich explizit angeben:

$$y(x) \;=\; p_n(x) \;=\; \frac{1}{\rho(x)} \left(\frac{d}{dx}\right)^n \big\{\, \sigma(x)^n \rho(x)\, \big\} \tag{3}$$

Dabei ist $\rho(x)$ die Lösung[1] von

$$\big[\, \sigma(x)\rho(x)\, \big]' \;=\; \tau(x)\rho(x)\ . \tag{4}$$

In unserem Fall ist jetzt also (wir ersetzen das ξ durch ein x)

$$\begin{aligned}
\sigma(x) &= 1 \\
\tau(x) &= -\,2x
\end{aligned}$$

und

$$\lambda \;=\; 2\varepsilon - 1$$

Die Bedingung (2) lautet also

$$\begin{aligned}
2\varepsilon - 1 &= -\,n\tau' \;-\; \tfrac{n(n-1)}{2}\, \sigma'' \;=\; +\,2n \\
\Leftrightarrow \qquad \varepsilon \;=\; \varepsilon_n &= n + \tfrac{1}{2}
\end{aligned}$$

[1]..oder eine Lösung, mit ρ ist auch $c\rho$ eine Lösung

Das sind, bis auf das $\hbar\omega$, genau die Eigenwerte für den harmonischen Oszillator. Die DGL (4) für das ρ lautet

$$\rho' \quad = \quad -\,2x\,\rho$$

Also

$$\rho(x) \quad = \quad C\,e^{-x^2}$$

und die Lösungsformel (3) liefert dann

$$\begin{aligned} v(x) \quad = \quad v_n(x) \quad &= \quad \frac{1}{\rho(x)} \left(\frac{d}{dx}\right)^n \left\{\, 1^n \; \rho(x) \,\right\} \\ &= \quad e^{+x^2} \left(\frac{d}{dx}\right)^n \; e^{-x^2} \end{aligned}$$

Bis auf ein Vorzeichen ist das identisch mit den Hermite-Polynomen, es gilt, so werden die Hermite-Polynome auch gelegentlich definiert,

$$H_n(x) \quad = \quad (-1)^n \; e^{+x^2} \left(\frac{d}{dx}\right)^n \; e^{-x^2}$$

Und das ψ ist dann also gegeben durch, bis auf eine multiplikative Normierungskonstante,

$$\psi \quad = \quad \psi_n(x) \quad = \quad c_n \; H_n(x) \; e^{-\frac{x^2}{2}} \quad .$$