

1. DER FREIE FALL

Ein quantenmechanisches Teilchen falle unter dem Einfluß der konstanten Gravitationskraft auf die Erde. Der Abstand über der Erdoberfläche sei x . Das Potential lautet dann

$$V(x) = \begin{cases} mgx & \text{für } x \geq 0, \\ \infty & \text{für } x < 0 \end{cases}$$

und der Hamiltonoperator ist somit

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad .$$

In der Ortsdarstellung lautet der Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad .$$

Da das Potential für $x < 0$ unendlich ist, muß die Wellenfunktion dort identisch Null sein

$$\Psi(x) = 0 \quad \text{für } x < 0 \quad .$$

Da die Wellenfunktion stetig und normierbar sein muß, haben wir für den Bereich über der Erdoberfläche ($x \geq 0$) die Randbedingungen

$$\Psi(0) = 0 \tag{1a}$$

$$\Psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0 \quad . \tag{1b}$$

Im Bereich $x \geq 0$ lautet die zeitabhängig Schrödingergleichung somit

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(x, t)}{dx^2} + mgx \Psi(x, t) = i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(x, t) \quad .$$

Es ist immer sinnvoll, insbesondere bei der numerischen Behandlung, dimensionslose Größen einzuführen, um die typische Zeit-, Längen und Energieskala

des Problems zu erhalten. In diesen *natürlichen Einheiten* sind alle Größen von der Ordnung $O(1)$. Wir setzen an

$$x = x_0 \xi \quad (2)$$

$$t = t_0 \tau \quad (3)$$

$$\Psi(x, t) = \Psi(x_0 \xi, t_0 \tau) =: \Phi(\xi, \tau) \quad . \quad (4)$$

Damit wird die Schrödingergleichung zu

$$-\frac{\hbar^2}{2mx_0^2} \frac{d^2 \Phi(\xi, \tau)}{d\xi^2} + mgx_0 \xi \Phi(\xi, \tau) = i \frac{\hbar}{t_0} \frac{d}{d\tau} \Phi(\xi, \tau) \quad (5)$$

$$-\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m^2 g x_0^3}}_{P_1} \frac{d^2 \Phi(\xi, \tau)}{d\xi^2} + \xi \Phi(\xi, \tau) = i \underbrace{\frac{\hbar}{t_0 m g x_0}}_{P_2} \frac{d}{d\tau} \Phi(\xi, \tau) \quad . \quad (6)$$

Nun können wir x_0 und t_0 so wählen, daß die beiden Parameterkombinationen P_1, P_2 beide zu Eins werden, d.h.

$$x_0 = \left(\frac{\hbar^2}{2m^2 g} \right)^{1/3} \quad (7)$$

$$t_0 = \frac{\hbar}{m g x_0} \quad . \quad (8)$$

In den natürlichen Einheiten wird die Schrödingergleichung zu

$$-\frac{d^2 \Phi(\xi, \tau)}{d\xi^2} + \xi \Phi(\xi, \tau) = i \frac{d}{d\tau} \Phi(\xi, \tau) \quad .$$

Welche Werte nehmen die natürlichen Einheiten für makroskopische Teilchen an? Wir wählen $m = 1kg$. Zur Erinnerung, das Plancksche Wirkungsquantum beträgt $\hbar = 1.05 \times 10^{-34} Js$ und die Fallbeschleunigung ist $g = 9.81m/sec^2$. Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} x_0 &= 8.28 \times 10^{-24} m \\ t_0 &= 1.30 \times 10^{-12} sec \end{aligned} \quad .$$

Mit dem Ansatz für die stationäre Lösung

$$\Phi(\xi, \tau) = \phi(\xi) e^{i\tau\varepsilon}$$

erhalten wir die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$-\frac{d^2 \phi(\xi)}{d\xi^2} + \xi \phi(\xi) = -\varepsilon \phi(\xi) \quad .$$

Aus dem Vergleich des Phasenfaktors (im Zeitentwicklungsoperator) vor und nach der Einführung der natürlichen Einheiten

$$\begin{aligned}\frac{t}{\hbar}E &= \frac{t_0\tau}{\hbar} E \stackrel{!}{=} \tau\varepsilon \\ E &= \frac{\hbar}{t_0}\varepsilon\end{aligned}$$

erhalten wir auch die natürliche Einheit der Energie

$$E_0 = \frac{\hbar}{t_0} = mgx_0 \quad , \quad (9)$$

also gerade die potentielle Energie, die zu x_0 gehört. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung kann auch in die Gestalt

$$-\frac{d^2\phi(\xi)}{d\xi^2} + (\xi - \varepsilon) \phi(\xi) = 0$$

gebracht werden. Wenn wir die neue Variable $z = \xi - \varepsilon$ einführen erhalten wir schließlich

$$\begin{aligned}-\frac{d^2\tilde{\phi}(z)}{dz^2} + z\tilde{\phi}(z) &= 0 \\ \tilde{\phi}(z) &:= \phi(\xi - \varepsilon) \quad .\end{aligned}$$

Bestimmen Sie mit Mathematica die beiden linear unabhängigen Lösungen und ermitteln Sie aus dem Verhalten dieser Lösungen für $z \rightarrow \infty$, welche Lösung physikalisch zulässig ist.

Die beiden Lösungen, sind die Airy-Funktionen Ai und Bi , wobei die letztere mit $z \rightarrow \infty$ divergiert und somit wegen Gl. (1b) keiner physikalische Lösung entspricht. Es bleibt also

$$\tilde{\phi}(z) = C \text{Ai}(z) \quad .$$

Die uns interessierende Lösung in ξ ist demnach

$$\phi(\xi) = C \text{Ai}(\xi - \varepsilon) \quad .$$

- **Ermitteln Sie aus der Randbedingung $\phi(\xi = 0) = 0$ die Energieeigenwerte ε_ν .**
- **Verifizieren Sie, daß die Lösung $\tilde{\phi}(z)$ für negative z sehr gut durch die Funktion**

$$\sqrt{\frac{1}{3\pi}} \cos\left(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right)$$

approximiert wird.

- **Wie lauten die Energieeigenwerte ε_ν , wenn man diese Näherungslösung verwendet.**
- **Wie lauten die exakten Eigenfunktionen $\phi_\nu(\xi)$?**

Nun muß nach Gl. (1a) $\phi(0) = 0$ gelten, d.h. $\text{Ai}(-\varepsilon) = 0$. Somit bestimmen die Nullstellen ξ_ν der Airy-Funktion die Eigenwerte des Hamiltonoperators

$$E_\nu = -E_0 \xi_\nu \quad \nu = 1, 2, \dots$$

Die Airy-Funktion hat nur Nullstellen bei negativen Werten, d.h. die Energie-Eigenwerte sind positiv, wie es aufgrund allgemeiner Überlegungen auch sein muß.

Die Nullstellen sind näherungsweise gegeben durch

$$\left(\left(2n - \frac{1}{2} \right) \frac{3\pi}{4} \right)^{2/3}$$

Die Energie-Eigenfunktionen sind als

$$\Phi_\nu(\xi) = \frac{1}{Z_\nu} \text{Ai}(\xi - \xi_\nu) \tag{10}$$

$$|Z_\nu|^2 = \int_0^\infty |\text{Ai}(\xi - \xi_\nu)|^2 d\xi \tag{11}$$

$$= \int_{-\xi_\nu}^\infty |\text{Ai}(\xi)|^2 d\xi \quad , \tag{12}$$

wobei Z_ν die Normierung der Funktion darstellt.