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

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

In der Ortsdarstellung lautet der Hamiltonoperator

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

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

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

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

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

$$\Psi(x) \xrightarrow[x\to\infty]{} 0 \qquad . \tag{1b}$$

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

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

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

$$
\begin{aligned}
x &= x_0 \xi && (2)\\
t &= t_0 \tau && (3)\\
\Psi(x,t) &= \Psi(x_0\xi, t_0\tau) =: \Phi(\xi,\tau) \qquad . && (4)
\end{aligned}
$$

Damit wird die Schrödingergleichung zu

$$
\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2mx_0^2}\,\frac{d^2\Phi(\xi,\tau)}{d\xi^2} + mgx_0\xi\Phi(\xi,\tau) &= i\frac{\hbar}{t_0}\frac{d}{d\tau}\,\Phi(\xi,\tau) && (5)\\
-\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m^2gx_0^3}}_{P_1}\,\frac{d^2\Phi(\xi,\tau)}{d\xi^2} + \xi\Phi(\xi,\tau) &= i\underbrace{\frac{\hbar}{t_0 mgx_0}}_{P_2}\,\frac{d}{d\tau}\,\Phi(\xi,\tau) \qquad . && (6)
\end{aligned}
$$

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

$$
\begin{aligned}
x_0 &= \left(\frac{\hbar^2}{2m^2g}\right)^{1/3} && (7)\\
t_0 &= \frac{\hbar}{mgx_0} \qquad . && (8)
\end{aligned}
$$

In den natürlichen Einheiten wird die Schrödingergleichung zu

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

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 $g = 9.81\mathrm{m/sec}^2$. Damit erhalten wir

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

Mit dem Ansatz für die stationäre Lösung

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

erhalten wir die zeitunabhängige Schrödingergleichung

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

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

$$\frac{t}{\hbar}E = \frac{t_0\tau}{\hbar}\ E \overset{!}{=} \tau\varepsilon$$
$$E = \frac{\hbar}{t_0}\varepsilon$$

erhalten wir auch die natürliche Einheit der Energie

$$E_0 = \frac{\hbar}{t_0} = mgx_0 \qquad , \tag{9}$$

also gerade die potentielle Energie, die zu x_0 gehört. Die zeitunabhängige Schrödingergleic 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

$$-\frac{d^2\tilde{\phi}(z)}{dz^2} + z\tilde{\phi}(z) = 0$$
$$\tilde{\phi}(z) := \phi(\xi - \varepsilon) \qquad .$$

Bestimmen Sie mit Mathematica die beiden linear unabhängigen Lösungen und ermitteln Sie aus dem Verhalten dieser Lösungen für $z \to \infty$, welche Lösung physikalisch zulässig ist.
Die beiden Lösungen, sind die Airy-Funktionen Ai und Bi, wobei die letztere mit $z \to \infty$ divergiert und somit wegen Gl. (1b) keiner physikalische Lösung entspricht. Es bleibt also

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

Die uns interessierende Lösung in ξ ist demnach

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

- **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. $\mathrm{Ai}(-\varepsilon) = 0$. Somit bestimmen die Nullstellen ξ_ν der Airy-Funktion die Eigenwerte des Hamitonoperators

$$E_\nu = -E_0\,\xi_\nu \qquad \nu = 1, 2, \ldots$$

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

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

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

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

wobei Z_ν die Normierung der Funktion darstellt.