Prof. U. Mosel, Dr. H. van Hees **Sommersemester 2009**

Übungen zur Quantenmechanik I

Lösungen zu Blatt 6 (Präsenzübung)

Präsenzaufgabe 9 (Neutronen im Gravitationsfeld)

(a) Die Anwendung des Ortsoperators auf die Wellenfunktion bedeutet einfach die Multiplikation mit $\vec{x}$. Das schreiben wir in Operationen mit $\vec{p}$ in der Fourierdarstellung um:

$$\begin{aligned}\hat{\vec{x}}\psi(\vec{x}) = \vec{x}\psi(\vec{x}) &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \vec{x} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}\right)\phi(\vec{p}) \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}_{\vec{p}} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}\right)\right]\phi(\vec{p}) \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}\right)[+\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}_{\vec{p}}\phi(\vec{p})].\end{aligned} \tag{1}$$

Da die Fouriertransformation umkehrbar eindeutig ist, lesen wir daraus ab, daß

$$\hat{\vec{x}}\phi(\vec{p}) = \mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}_{\vec{p}}\,\phi(\vec{p}) \tag{2}$$

sein muß.

Für den Impulsoperator gilt

$$\hat{\vec{p}}\psi(\vec{x}) = -\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}_{\vec{x}}\psi(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}\right)[\vec{p}\phi(\vec{p})]. \tag{3}$$

Es gilt also

$$\hat{\vec{p}}\phi(\vec{p}) = \vec{p}\phi(\vec{p}). \tag{4}$$

Man nennt daher $\phi(\vec{p})$ auch die „Wellenfunktion in der Impulsdarstellung" und $\psi(\vec{x})$ die Wellenfunktion in der Ortsdarstellung[1].

(b) Damit finden die zeitunabhängige Schrödingergleichung in der Impulsdarstellung:

$$\hat{H}\phi(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m}\phi(\vec{p}) + \mathrm{i}\hbar m g \frac{\partial}{\partial p_3}\phi(\vec{p}) \stackrel{!}{=} E\phi(\vec{p}). \tag{5}$$

(c) Gehen wir mit dem Ansatz $\phi(\vec{p}) = \phi_1(p_1)\phi_2(p_2)\phi_3(p_3)$ in diese Gleichung, liefert dies nach einigen einfachen Umformungen

$$\frac{p_1^2 + p_2^2}{2m} - E = -\mathrm{i}\hbar m g \frac{\phi'(p_3)}{\phi_3(p_3)} - \frac{p_3^2}{2m}. \tag{6}$$

Da die linke Seite dieser Gleichung nicht von p_3 und die rechte nicht von p_1 und p_2 abhängt, muß es sich um eine Konstante handeln, die wir mit $-E_3$ bezeichnen wollen.

Formen wir die dann entstehende Gleichung wieder um, finden wir für ϕ_3:

$$\frac{p_3^2}{2m}\phi_3(p_3) + \mathrm{i}\hbar m g \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p_3}\phi_3(p_3) = E_3\phi_3(p_3). \tag{7}$$

[1] Formal handelt es sich um die Entwicklung des Zustandes nach Impuls- bzw. Ortseigenvektoren. Dies wird in der Vorlesung später noch ausführlich behandelt werden.

Das ist die zeitunabhängige Schrödingergleichung für die eindimensionale Bewegung des Neutrons unter Einwirkung des konstanten Gravitationsfeldes der Erde entlang der x_3-Achse.

Es gilt weiter für den Energieeigenwert der dreidimensionalen Bewegung

$$E = \frac{p_1^2 + p_2^2}{2m} + E_3. \tag{8}$$

Das entspricht der freien Bewegung in der (x_1, x_2)-Ebene, ganz analog zum klassischen Problem des freien Falls eines Teilchens.

(d) Unser Seperationsansatz liefert keine Einschränkungen an die Wellenfunktionen ϕ_1 und ϕ_2. Um sie festzulegen, müssen wir noch zwei weitere zu $\hat{H}$ und untereinander kompatible Observable finden, damit der Zustand durch Festlegung dieser drei Observablen eindeutig bestimmt ist. Es ist klar, daß $\hat{p}_1$ und $\hat{p}_2$ sowohl untereinander als auch jeweils mit $\hat{H}$ vertauschen. Wählen wir also p_1, p_2 und H als vollständigen Satz kompatibler Observabler und suchen nach simultanen Eigenfunktionen, müssen ϕ_1 und ϕ_2 Eigenfunktionen von $\hat{p}_1$ bzw. $\hat{p}_2$ sein. In der Impulsdarstellung sind dies δ-Distributionen. Bezeichnen wir die Eigenwerte mit p_1' und p_2', finden wir also als Lösungen

$$\phi_j(p_j) = \delta(p_j - p_j'); \quad j = 1, 2. \tag{9}$$

Insgesamt ist unsere simultane Eigenfunktion in der Impulsdarstellung für diesen vollständigen Satz kompatibler Observabler also durch

$$\phi_{E,p_1',p_2'}(\vec{p}) = \delta(p_1 - p_1')\delta(p_2 - p_2')\phi_3(p_3) \tag{10}$$

gegeben, wobei ϕ_3 eine Lösung von (7) muß, und der Energieeigenwert ist dann gemäß (8) durch

$$E = \frac{{p_1'}^2 + {p_2'}^2}{2m} + E_3 \tag{11}$$

bestimmt. Es ist klar, daß $p_1', p_2' \in \mathbb{R}$.

Für $p_1' = p_2' = 0$ ergibt sich dann die angegebene spezielle Lösung. Dies entspricht Neutronen, die sich nur in x_3-Richtung bewegen, also dem freien Fall bzw. senkrechten Wurf des Teilchens im Schwerefeld der Erde. Es ist dann freilich $E_3 = E$, und wir werden im folgenden nur diesen Fall betrachten und statt E_3 stets E schreiben[2].

Die Differentialgleichung (7) ist linear in erster Ordnung und läßt sich daher problemlos durch „Separation der Variablen" lösen. Es ergibt sich

$$\phi_{3,E}(p_3) = A(E) \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar m g}\left(\frac{p_3^3}{6m} - E p_3\right)\right]. \tag{12}$$

Es ist klar, daß alle Werte $E \in \mathbb{R}$ erlaubt sind, und daß diese Eigenfunktionen lediglich auf die δ-Distribution normierbar sind (kontinuierliches Eigenwertspektrum). Das war auch zu erwarten, denn die Bewegung ist ja zu negativen x_3-Werten hin ungebunden, da das Neutron unabhängig von seiner Gesamtenergie einfach beliebig frei nach unten fallen kann. Es ist auch sehr einfach, die Normierungskonstante aus der Forderung

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p_3 \phi_{3,E'}^*(p_3)\phi_{3,E}(p_3) \stackrel{!}{=} \delta(E - E') \tag{13}$$

[2] Damit ist aber auch der allgemeine Fall gelöst, denn die Lösung von (8) beeinflußt ja die Festlegung der ϕ_1 und ϕ_2 als Impulseigenfunktionen nicht. Im realen Experiment bewegten sich selbstverständlich die Neutronen auch in x_1 und x_2-Richtung. Es lohnt sich, die zitierten Paper zu lesen und über das Experiment im Hinblick auf die Interpretation der Quantentheorie (Präparation, Messung, statistische Bedeutung der Wellenfunktion usw.) nachzudenken!

zu bestimmen. Obwohl wir sie für die weitere Aufgabenstellung nicht benötigen, geben wir das Resultat an. Bis auf einen Phasenfaktor ist (rechnen Sie das nach!)

$$A(E) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar m g}}. \tag{14}$$

(e) Die Ortsdarstellung der Wellenfunktion erhalten wir aus der Fouriertransformation, wie wir sie in Aufgabenteil (a) verwendet haben. Durch die δ-Distributionen lassen sich die Integrale nach p_1 und p_2 sofort auswerten. Man findet insgesamt

$$\psi_{p_1'=0,p_2'=0,E}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)} \underbrace{A(E) \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p_3 \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar m g}\left(\frac{p_3^3}{6m} + (mgx_3 - E_3)p_3\right)\right]}_{\psi_{3,E}(\vec{x})} \tag{15}$$

Daraus lesen wir sofort ab, daß in der Tat

$$\psi_{3,E}(x_3) = \psi_{3,E=0}(x_3 - z_E) \quad \text{mit} \quad z_E = \frac{E}{mg} \tag{16}$$

ist. Das Integral läßt sich nicht durch elementare Funtionen lösen, sondern führt auf die Airyfunktion Ai, die auf dem Aufgabenblatt über ihre Fourierdarstellung definiert und geplottet ist.

Sie ist für $x_3 < 0$ von oszillatorischem Charakter, entsprechend der ungebundenen Bewegung in diese Richtung und fällt für $x_3 \gg 0$ exponentiell ab[3].

(f) Plaziert man den (mit der unendlich hohen Potentialbarriere idealisiert beschriebenen) Neutronenspiegel bei $x_3 = 0$, kann das Neutron nicht mehr in den Bereich $x_3 < 0$ eindringen, d.h. es ist

$$\psi_{p_1'=0,p_2'=0,E}(\vec{x}) \equiv 0 \quad \text{für} \quad x_3 \leq 0. \tag{17}$$

Da die Wellenfunktion bei $x_3 = 0$ stetig sein muß, führt dies wegen (16) auf die Forderung

$$\psi_{3,E}(x_3 = 0) = \psi_{3,E=0}(-z_E). \tag{18}$$

Es sind also nur solche Werte für z_E und damit E erlaubt, für die $\psi_{3,E=0}(-z_E) = 0$ ist. Substituiert man nun in dem Integral (15) $p_3 = (2m^2 g\hbar)^{1/3} k$, findet man durch Vergleich mit der Definition der Airyfunktion Ai auf dem Übungsblatt

$$\psi_{3,E=0}(x_3) = A' \mathrm{Ai}\left[\left(\frac{2m^2 g}{\hbar^2}\right)^{1/3} x_3\right]. \tag{19}$$

Die Normierungskonstante A' ist für uns im folgenden nicht wichtig. Bezeichnen wir die allesamt im Negativen gelegenen Nullstellen der Airyfunktion der Reihe nach mit $-\xi_j$ ($j \in \mathbb{N}$, denn es gibt unendlich viele Nullstellen), sind also mögliche Werte für z_E bzw. E:

$$z_{E,j}\left(\frac{2m^2 g}{\hbar^2}\right)^{1/3} = \frac{E_j}{mg}\left(\frac{2m^2 g}{\hbar^2}\right)^{1/3} = \xi_j \tag{20}$$

[3] Zur genaueren Herleitung der asymptotischen Eigenschaften der Airyfunktion mit Hilfe der Sattelpunktsnäherung sei auf Landau/Lifschitz Bd. 3 verwiesen. Die Airyfunktion steht in Mathematica als `AiryAi[x]`, ihre Nullstellen als `AiryAiZero[j]` zur Verfügung.

gegeben. Die Wellenfunktionen zu diesen diskreten Eigenwerten sind dann

$$\psi_j(x_3) = \begin{cases} 0 & \text{für } x_3 \leq 0 \\ \psi_{3,E=0}(x_3 - z_{E,j}) & \text{für } x_3 > 0. \end{cases} \tag{21}$$

Da die Airyfunktion für $x_3 \to \infty$ exponentiell[4] abfällt, ist diese Wellenfunktion quadratintegrabel. Hinsichtlich der Bewegung in x_3-Richtung ist also wegen der Einführung des Spiegels das Neutron nun gebunden. Der j-te Eigenzustand weist übrigens $(j-1)$ Knoten (Nullstellen außer der bei $x_3 = 0$) auf.

(g) Setzt man die auf dem Blatt gegebenen Zahlenwerte für die Naturkonstanten und die ersten drei Nullstellen der Airyfunktion ein, findet man für die ersten drei Energieeigenwerte gemäß (20)

$$E_1 = 1.41\,\text{peV}, \quad E_2 = 2.46\,\text{peV}, \quad E_3 = 3.32\,\text{peV}. \tag{22}$$

Das sind selbst auf den Energieskalen der Atomphysik winzige Energien!

[4] Genauer gesagt ist $\mathrm{Ai}(\xi) \approx \exp(-2/3\,\xi^{3/2})/(2\sqrt{\pi}\xi^{1/4})$ für $\xi \gg 1$