

# Theoretische Physik IV: Quantenmechanik (PTP4)

Universität Heidelberg  
Sommersemester 2021

Dozent: Prof. Dr. Matthias Bartelmann  
Obertutor: Dr. Carsten Littek

## Übungsblatt 6

Besprechung in den virtuellen Übungsgruppen in der Woche 24. - 29. Mai 2021

Bitte geben Sie maximal 2 Aufgaben per Übungsgruppensystem zur Korrektur an Ihre Tutorin / Ihren Tutor!

Nutzen Sie dazu den Link <https://uebungen.physik.uni-heidelberg.de/h/1291>

### 1. Verständnisfragen

- Was bedeutet ein "Pfad" im Pfadintegral für eine Feldtheorie wie die Elektrodynamik?
- Können Sie Leiteroperatoren für einen harmonischen Oszillator in Impulsdarstellung aufstellen?
- Wie können Sie, ausgehend vom harmonischen Oszillator in einer Dimension, einen N-dimensionalen harmonischen Oszillator quantenmechanisch beschreiben?

### 2. Der harmonische Oszillator im Heisenberg-Bild

Im Heisenberg-Bild steckt die gesamte Zeitabhängigkeit in den Operatoren, und deren Dynamik wird durch die Heisenberg-Gleichung beschrieben. Betrachten Sie im Folgenden den eindimensionalen harmonischen Oszillator mit

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}_H^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}_H^2.$$

- Lösen Sie die Heisenberg-Gleichungen für die Operatoren  $\hat{x}_H(t)$  und  $\hat{p}_H(t)$  der Orts- und Impulsvariablen des harmonischen Oszillators, und drücken Sie  $\hat{p}_H(t)$  und  $\hat{x}_H(t)$  als Funktion der Operatoren  $\hat{p}_S \equiv \hat{p}_H(t=0)$  und  $\hat{x}_S \equiv \hat{x}_H(t=0)$  im Schrödinger-Bild aus.\*
- Berechnen Sie mit den Ergebnissen aus a) die folgenden Vertauschungsrelationen zu verschiedenen Zeiten  $t_1$  und  $t_2$ ,

$$[\hat{p}_H(t_2), \hat{p}_H(t_1)], \quad [\hat{p}_H(t_2), \hat{x}_H(t_1)], \quad [\hat{x}_H(t_2), \hat{x}_H(t_1)].$$

### 3. Delta-Potential

Betrachten Sie ein Teilchen der Masse  $m$  in einem eindimensionalen attraktiven Potential

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{m\lambda_0} \delta_D(x) \quad (\lambda_0 > 0).$$

Wir interessieren uns für Lösungen der stationären Schrödingergleichung  $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$  mit negativer Energie  $E < 0$ , d.h. gebundene Zustände. Wir schreiben die Energie als  $E = -\hbar^2 K^2/2m$  für  $K > 0$ .

- Nehmen Sie an, dass die Wellenfunktion  $\psi(x)$  stetig ist bei  $x = 0$ , und leiten Sie eine Beziehung zwischen dem Sprung der Ableitung  $\psi'(x)$  und  $\psi(x=0)$  her, indem Sie die Schrödingergleichung in einem kleinen Bereich zwischen  $x = -\epsilon$  und  $x = +\epsilon$  integrieren.

---

\*Hinweis: Machen Sie Gebrauch von Ihrer Kenntnis des Kommutators zwischen Orts- und Impulsoperator.

- b) Wie viele gebundene Zustände gibt es, und bei welchen Energien? Gibt es gebundene Zustände im Fall eines repulsiven  $\delta$ -Potentials ( $\lambda_0 < 0$ )?

#### 4. Neutronen im Gravitationsfeld

In einer Arbeitsgruppe am Physikalischen Institut wurden kalte Neutronen im Gravitationsfeld der Erde auf einen horizontalen Spiegel fallen gelassen und die sich dann ergebenden stationären Energieniveaus gemessen (siehe z.B. <https://journals.aps.org/prd/abstract/10.1103/PhysRevD.67.102002> und weiterführend <https://www.nature.com/articles/nphys1970>). Angenommen, der Spiegel reflektiert die Neutronen perfekt und befindet sich auf der Höhe  $z = 0$ . Das Potential ist dann gegeben durch

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

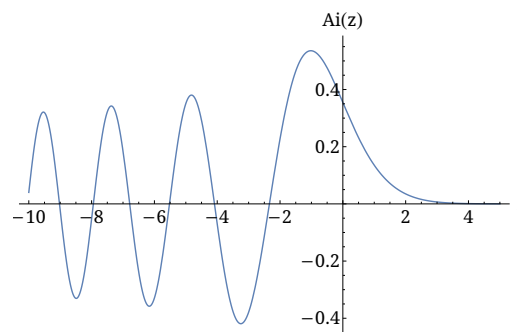
wobei  $m$  die Masse eines Neutrons ist und  $g$  die Gravitationsbeschleunigung.

- a) Wie lautet die Schrödinger-Gleichung im Ortsraum für positive  $z$ ?

Die allgemeine Lösung im Ortsraum ist nicht durch elementare Funktionen darstellbar, da die sich ergebende Schrödinger-Gleichung eine Variante der sog. *Airy'schen Differentialgleichung* ist. Es ist jedoch möglich, einen Integralausdruck wie folgt zu gewinnen.

- b) Geben Sie die Schrödinger-Gleichung im Impulsraum an.  
 c) Finden Sie die allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung im Impulsraum.  
 d) Schreiben Sie die Wellenfunktion im Ortsraum für  $z \geq 0$  als Integral über die so bestimmten Fouriermoden. Die Normierung und die Energie können Sie zunächst unbestimmt lassen.  
 e) Welche Randbedingung muss die Wellenfunktion bei  $z = 0$  erfüllen? Führen Sie damit die Energien  $E_n$  der gebundenen Zustände auf die Nullstellen der *Airy-Funktion*  $\text{Ai}$  zurück, welche definiert ist als

$$\text{Ai}(z) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \cos\left(\frac{t^3}{3} + tz\right).$$



Die Nullstellen von  $\text{Ai}(z)$  sind negative reellen Zahlen, für die kein geschlossener Ausdruck bekannt ist, sondern die numerisch bestimmt werden müssen. So ist die erste Nullstelle bei  $z_0 \approx -2.33811$ .

- f) Berechnen Sie die Grundzustandsenergie in eV.

# Theoretische Physik IV: Quantenmechanik (PTP4)

Universität Heidelberg  
Sommersemester 2021

Dozent: Prof. Dr. Matthias Bartelmann  
Obertutor: Dr. Carsten Littek

## Übungsblatt 6: Lösung

### 1. Verständnisfragen

- a) Eine Feldtheorie beschreibt die Dynamik eines Feldes  $\varphi(\mathbf{x})$ , das üblicherweise von der 4-dim. Raumzeit abhängt. Im Falle der Elektrodynamik ist dies das Viererpotential. Das Pfadintegral in einer Feldtheorie kann geschrieben werden als:

$$Z \sim \int \mathcal{D}\varphi \exp(i\hbar S[\varphi]).$$

Es ist ein Funktionalintegral, da über die Funktion  $\varphi$  integriert wird, die wiederum eine Funktion des Vektors  $\mathbf{x}$  ist. Wir sprechen von einer Feldkonfiguration  $\varphi(\mathbf{x})$  als Punkt in einem Funktionenraum, der den Kern des Wirkungsfunctionals bildet. Ein "Pfad" durch diesen Funktionenraum beschreibt eine Folge von Feldkonfigurationen, die alle der Feldgleichung genügen.

- b) Ja. In der Impulsdarstellung nimmt der Hamilton-Operator die Form

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - m\omega^2 \frac{\partial^2}{\partial p^2}$$

an. Analog zu der charakteristischen Länge  $l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$  in Ortsdarstellung können wir einen charakteristischen Impuls  $\lambda = \sqrt{\hbar m\omega}$  einführen. Dann skalieren wir den Impuls in der Schrödingergleichung und erhalten

$$\begin{aligned} p &= \lambda v & \frac{\partial}{\partial p} &= \lambda^{-1} \frac{\partial}{\partial v} \\ \Rightarrow \frac{\hbar\omega}{2} \left( -\frac{\partial^2}{\partial v^2} + v^2 \right) \psi &= E\psi. \end{aligned}$$

Dies ist dieselbe Form wie in der Ortsdarstellung, sodass auch hier entsprechende Leiteroperatoren definiert werden können. Der Unterschied liegt in den Variablen  $v$  und  $u$  (vgl. Skript).

- c) Der eindimensionale harmonische Oszillator kann auf  $N$  Dimensionen erweitert werden, indem man nun  $N$  Orts- und Impulskoordinaten einführt:  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots)^\top$  und  $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots)^\top$ . Diese erfüllen die Kommutatorrelationen

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0 \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$$

Der dazugehörige Hamilton-Operator hat folgende Form

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}_i^2 \right)$$

Dies sind also  $N$  unabhängige harmonische Oszillatoren mit Kreisfrequenz  $\omega$ . Tatsächlich können die Kreisfrequenzen für die  $N$  Oszillatoren unterschiedlich sein. Die zugehörigen Zustände sind Tensorprodukte von Zuständen des eindimensionalen harmonischen Oszillators, z.B.  $|\psi_{n_1, n_2, n_3}\rangle = |\psi_{n_1}\rangle \otimes |\psi_{n_2}\rangle \otimes |\psi_{n_3}\rangle$  in drei Dimensionen. Die Energie-Eigenwerte sind dann gegeben durch die Energien der  $N$  Grundzustände plus den Anregungszuständen  $n_i$  der  $N$  Oszillatoren

$$E_{\mathbf{n}} = \hbar\omega \left( n_1 + n_2 + n_3 + \dots + \frac{N}{2} \right).$$

Hier ist  $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3, \dots, n_N)$  mit  $n_i \in \mathbb{N}$  ein Vektor, der den  $N$  Besetzungszahlen entspricht.

## 2. Der harmonische Oszillator im Heisenberg-Bild

- a) Die Zeitentwicklung von Operatoren  $\hat{A}_H$  im Heisenberg-Bild ist gegeben durch die Heisenberg-Gleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H = [\hat{A}_H, \hat{H}_H] = -[\hat{H}_H, \hat{A}_H],$$

wenn der Operator  $\hat{A}$  im Schrödinger-Bild nicht explizit zeitabhängig ist. Deshalb gilt

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{x}_H}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_H, \hat{x}_H] \\ &= \frac{i}{\hbar} \left( \frac{1}{2m} [\hat{p}_H^2, \hat{x}_H] + \frac{1}{2} m\omega^2 \underbrace{[\hat{x}_H^2, \hat{x}_H]}_{=0} \right) \\ &= \frac{i}{2m\hbar} \left( \underbrace{\hat{p}_H [\hat{p}_H, \hat{x}_H]}_{=-i\hbar} + \underbrace{[\hat{p}_H, \hat{x}_H] \hat{p}_H}_{=-i\hbar} \right) = \frac{\hat{p}_H}{m} \end{aligned}$$

Die Kommutatoren werden zur gleichen Zeit für  $\hat{p}_H$  und  $\hat{x}_H$  ausgewertet, deswegen kann der Hinweis auf dem Blatt angewendet werden. Analog findet man

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{p}_H}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_H, \hat{p}_H] \\ &= \frac{i}{\hbar} \left( \frac{1}{2m} \underbrace{[\hat{p}_H^2, \hat{p}_H]}_{=0} + \frac{1}{2} m\omega^2 [\hat{x}_H^2, \hat{p}_H] \right) \\ &= \frac{im\omega^2}{2\hbar} \left( \underbrace{\hat{x}_H [\hat{x}_H, \hat{p}_H]}_{=i\hbar} + \underbrace{[\hat{x}_H, \hat{p}_H] \hat{x}_H}_{=i\hbar} \right) = -m\omega^2 \hat{x}_H. \end{aligned}$$

Durch nochmaliges Ableiten können diese Gleichungen kombiniert werden zu

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \hat{x}_H}{dt^2} + \omega^2 \hat{x}_H &= 0, \\ \frac{d^2 \hat{p}_H}{dt^2} + \omega^2 \hat{p}_H &= 0. \end{aligned}$$

Die Lösungen dafür sind mit  $\hat{x}_H(t=0) \equiv \hat{x}_S$  und  $\hat{p}_H(t=0) \equiv \hat{p}_S$  gegeben durch

$$\begin{aligned} \hat{x}_H(t) &= \hat{x}_S \cos(\omega t) + \frac{\hat{p}_S}{m\omega} \sin(\omega t), \\ \hat{p}_H(t) &= \hat{p}_S \cos(\omega t) - m\omega \hat{x}_S \sin(\omega t). \end{aligned}$$

b) Die Kommutatoren zu verschiedenen Zeiten sind gegeben durch

$$\begin{aligned}
 [\hat{p}_H(t_2), \hat{p}_H(t_1)] &= [\hat{p}_S \cos(\omega t_2) - m\omega \hat{x}_S \sin(\omega t_2), \hat{p}_S \cos(\omega t_1) - m\omega \hat{x}_S \sin(\omega t_1)] \\
 &= -m\omega \cos(\omega t_2) \sin(\omega t_1) [\hat{p}_S, \hat{x}_S] - m\omega \sin(\omega t_2) \cos(\omega t_1) [\hat{x}_S, \hat{p}_S] \\
 &= i\hbar m\omega [\cos(\omega t_2) \sin(\omega t_1) - \sin(\omega t_2) \cos(\omega t_1)] \\
 &= -i\hbar m\omega \sin[\omega(t_2 - t_1)],
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\hat{p}_H(t_2), \hat{x}_H(t_1)] &= \left[ \hat{p}_S \cos(\omega t_2) - m\omega \hat{x}_S \sin(\omega t_2), \hat{x}_S \cos(\omega t_1) + \frac{\hat{p}_S}{m\omega} \sin(\omega t_1) \right] \\
 &= \cos(\omega t_2) \cos(\omega t_1) [\hat{p}_S, \hat{x}_S] - \sin(\omega t_2) \sin(\omega t_1) [\hat{x}_S, \hat{p}_S] \\
 &= -i\hbar [\cos(\omega t_2) \cos(\omega t_1) + \sin(\omega t_2) \sin(\omega t_1)] \\
 &= -i\hbar \cos[\omega(t_2 - t_1)],
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\hat{x}_H(t_2), \hat{x}_H(t_1)] &= \left[ \hat{x}_S \cos(\omega t_2) + \frac{\hat{p}_S}{m\omega} \sin(\omega t_2), \hat{x}_S \cos(\omega t_1) + \frac{\hat{p}_S}{m\omega} \sin(\omega t_1) \right] \\
 &= \frac{1}{m\omega} \cos(\omega t_2) \sin(\omega t_1) [\hat{x}_S, \hat{p}_S] + \frac{1}{m\omega} \sin(\omega t_2) \cos(\omega t_1) [\hat{p}_S, \hat{x}_S] \\
 &= \frac{i\hbar}{m\omega} [\cos(\omega t_2) \sin(\omega t_1) - \sin(\omega t_2) \cos(\omega t_1)] \\
 &= -\frac{i\hbar}{m\omega} \sin[\omega(t_2 - t_1)].
 \end{aligned}$$

### 3. Delta-Potential

a) Die Schrödingergleichung mit dem Delta-Potential hat die Form

$$\psi''(x) - \frac{2}{\lambda_0} \delta_D(x) \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x)$$

Diese Gleichung integrieren wir über das Intervall  $(-\epsilon, \epsilon)$

$$\begin{aligned}
 \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \underbrace{\left( -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) \right)}_{w(x)} dx &= \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi''(x) dx + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{2}{\lambda_0} \delta_D(x) \psi(x) dx \\
 2\epsilon w(\xi) &= \psi'(x)|_{-\epsilon}^{\epsilon} + \frac{2}{\lambda_0} \psi(0).
 \end{aligned}$$

Hier haben wir den Mittelwertsatz der Integralrechnung genutzt, da  $\psi(x)$  stetig ist, und  $\xi \in (-\epsilon, \epsilon)$ . Bilden wir den Grenzwert  $\epsilon \rightarrow 0$ , dann finden wir den Sprung der Ableitung bei  $x = 0$  zu

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2}{\lambda_0} \psi(0),$$

wobei das Argument  $0^\pm$  von positiver bzw. negativer Richtung genähert bedeutet.

b) Ein im Delta-Potential gebundener Zustand muss in großer Entfernung vom Potential verschwinden, d.h. für  $x \rightarrow \pm\infty$  muss  $\psi(x) \rightarrow 0$  gelten. Wir benutzen den Ansatz

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{Kx} & x < 0 \\ B e^{-Kx} & x > 0 \end{cases}.$$

Hier ist  $K > 0$  und wie in der Aufgabenstellung  $E = -\hbar^2 K^2 / 2m$ .

Die Stetigkeit von  $\psi$  bei  $x = 0$  bedeutet, dass für die Amplituden  $A = B$  gilt. Der Sprung der ersten Ableitung bei  $x = 0$  führt auf

$$K = \lambda_0^{-1}.$$

Daraus folgt, dass es nur einen gebundenen Zustand für ein attraktives Potential mit  $\lambda_0 > 0$  gibt. Dieser Zustand hat die Energie

$$E = -\frac{\hbar^2 K^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m\lambda_0^2}.$$

Für ein repulsives Delta-Potential mit  $\lambda_0 < 0$  gibt es keine gebundenen Zustände. Denn in diesem Fall ist  $K < 0$  und die Lösung ist physikalisch nicht sinnvoll.

#### 4. Neutronen im Gravitationsfeld

a) Da es sich um stationäre Zustände handelt, lautet die Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} + (E - mgz) \psi(z) = 0.$$

b) Im Impulsraum lautet die Schrödinger-Gleichung

$$\left( \frac{p^2}{2m} - E \right) \tilde{\psi}(p) + i\hbar mg \frac{d\tilde{\psi}(p)}{dp} = 0.$$

c) Aus

$$\frac{d\tilde{\psi}(p)}{dp} = \frac{1}{i\hbar mg} \left( E - \frac{p^2}{2m} \right) \tilde{\psi}(p)$$

folgt nach Trennung der Variablen

$$\frac{d\tilde{\psi}(p)}{\tilde{\psi}(p)} = \frac{1}{i\hbar mg} \left( E - \frac{p^2}{2m} \right) dp$$

und demnach

$$\tilde{\psi}(p) = C \cdot \exp\left(\frac{-iE}{\hbar mg} p + \frac{i}{6\hbar m^2 g} p^3\right),$$

wobei  $C$  eine Integrationskonstante ist.

d) Die Wellenfunktion im Ortsraum ist durch eine Fourier-Transformation gegeben,

$$\begin{aligned} \psi(z) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipz/\hbar} \tilde{\psi}(p) \\ &= \frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \left( z - \frac{E}{mg} \right) p + \frac{p^3}{6m^2 g} \right] \right\}. \end{aligned}$$

e) Für  $z = 0$  muss  $\psi = 0$  sein, da das Potential unendlich hoch ist und die Wellenfunktion somit nicht in den Bereich  $z < 0$  eindringen kann. Also gilt, dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \left( -\frac{E}{mg} \right) p + \frac{p^3}{6m^2 g} \right] \right\} \stackrel{!}{=} 0.$$

Die Substitution  $t \equiv p/(2\hbar m^2 g)^{1/3}$  führt dann auf

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \exp \left\{ i \left[ \frac{t^3}{3} - \left( \frac{2}{\hbar^2 m g^2} \right)^{1/3} E t \right] \right\} = 0.$$

Da

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i f(t)} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \cos f(t) + i \int_{-\infty}^{\infty} dt \sin f(t)$$

und  $f(t)$  die Form  $f(t) = at^3 + bt$  hat, damit also ungerade ist, gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i f(t)} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \cos f(t)$$

und somit

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \cos \left[ \frac{t^3}{3} - \left( \frac{2}{\hbar^2 m g^2} \right)^{1/3} E t \right] = 2\pi \cdot \text{Ai} \left[ - \left( \frac{2}{\hbar^2 m g^2} \right)^{1/3} E \right] = 0.$$

Wenn also  $z_n$  die  $n$ -te Nullstelle der Airy-Funktion ist, dann gilt für die möglichen Energiewerte

$$E_n = - \left( \frac{\hbar^2 m g^2}{2} \right)^{1/3} z_n.$$

f) Für  $z_0 = -2,34$ ,  $g = 9,81 \text{ m s}^{-2}$ ,  $m = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ ,  $\hbar = 6,58 \cdot 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s}$  ergibt sich

$$E_0 = 1,4 \cdot 10^{-12} \text{ eV} = 1,4 \text{ peV}.$$