Quantenmechanik II
FSU Jena - WS 2009/2010
Übungsserie 07 - Lösungen

Stilianos Louca

January 6, 2010

Aufgabe 14

Die zeitfreie Schrödingergleichung

$$\left[\frac{P^2}{2m} + V\right]\psi = E\psi$$

nimmt in Ortsdarstellung die Form

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \cdot \partial_x^2\psi - (Ax + E)\psi = 0 \tag{0.1}$$

bzw. in Impulsdarstellung die Form

$$\left(\frac{p^2}{2m} - E\right)\widetilde{\psi} - i\hbar A \cdot \partial_p\widetilde{\psi} = 0 \tag{0.2}$$

an, wobei

$$\widetilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{-i\frac{p}{\hbar}x}\psi(x)\ dx \tag{0.3}$$

die Fourier-Transformierte von $\psi(x)$ sei.

(a) **Motivierung der Substitution**

Erlaubter Bereich: Betrachtet sei zunächst der Definitionsbereich $Ax + E \geq 0$, dazu die Variablensubstitution $x \to y,\ y = y(x)$. Wegen

$$\partial_x^2\psi = (\partial_y^2\psi)(\partial_x y)^2 + (\partial_y\psi)(\partial_x^2 y)$$

nimmt (0.1) die Form

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_x y)^2 \cdot \partial_y^2\psi - \frac{\hbar^2}{2m}(\partial_x^2 y) \cdot \partial_y\psi - (Ax + E) \cdot \psi = 0$$

bzw. nach Multiplikation mit $\frac{-2my^2}{\hbar^2(\partial_x y)^2}$ die Form

$$y^2 \cdot \partial_y^2\psi + \frac{y^2(\partial_x^2 y)}{(\partial_x y)^2} \cdot \partial_y\psi + (Ax + E)\frac{2my^2}{\hbar^2(\partial_x y)^2} \cdot \psi = 0 \tag{0.4}$$

an. Fordern nun

$$(Ax + E)\frac{2my^2}{\hbar^2(\partial_x y)^2} \overset{!}{=} y^2$$

was z.B. erfüllt ist für

$$\partial_x y = \frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2m(Ax + E)}$$

bzw.

$$y(x) = \frac{\sqrt{8m}}{3A\hbar}(Ax+E)^{\frac{3}{2}} \tag{0.5}$$

Dann nimmt (0.1) die Form

$$y^2 \cdot \partial_y^2\psi + \frac{y}{3} \cdot \partial_y\psi + y^2 \cdot \psi = 0 \tag{0.6}$$

an. Durch die Substitution $\psi(y) =: f(y) \cdot \varphi(y)$, also

$$\partial_y\psi = (\partial_y f) \cdot \varphi + f \cdot \partial_y\varphi \quad , \quad \partial_y^2\psi = (\partial_y^2 f) \cdot \varphi + 2(\partial_y f) \cdot (\partial_y\varphi) + f \cdot \partial_y^2\varphi \quad ,$$

nimmt (0.6) nach Multiplikation mit $\frac{1}{f}$ die Form

$$y^2 \cdot \partial_y^2\varphi + \left(2y^2\frac{f'}{f} + \frac{y}{3}\right) \cdot \partial_y\varphi + \left(y^2\frac{f''}{f} + \frac{y}{3}\frac{f'}{f} + y^2\right) \cdot \varphi = 0$$

an. Fordert man

$$2y^2\frac{f'}{f} + \frac{y}{3} \stackrel{!}{=} y$$

sprich

$$f(y) = C \cdot \sqrt[3]{y} \quad , \quad C : \text{const}$$

so nimmt (0.6) die Form

$$y^2 \cdot \partial_y^2\varphi + y \cdot \partial_y\varphi + \left(y^2 - \frac{1}{3^2}\right) \cdot \varphi = 0 \tag{0.7}$$

an, was einer Besselschen Differentialgleichung entspricht!

Verbotener Bereich: Ähnlich führt für $Ax + E < 0$ die Substitution

$$y(x) := \frac{\sqrt{8m}}{3A\hbar}(-Ax-E)^{\frac{3}{2}} \tag{0.8}$$

auf die Differentialgleichung

$$y^2 \cdot \partial_y^2\varphi + y \cdot \partial_y\varphi - \left(y^2 + \frac{1}{3^2}\right) \cdot \varphi = 0 \tag{0.9}$$

was einer modifizierten Besselschen Differentialgleichung entspricht.

Durchführung der Substitution

Hinsichtlich obiger Überlegungen, machen wir zur Lösung von (0.1) die Substitution

$$\psi(x) =: \sqrt[3]{y(x)} \cdot \varphi(y(x)) \quad , \quad y = y(x) := \frac{\sqrt{8m}}{3A\hbar} \cdot \begin{cases} (Ax+E)^{\frac{3}{2}} & : Ax+E \geq 0 \\ |Ax+E|^{\frac{3}{2}} & : Ax+E < 0 \end{cases} \tag{0.10}$$

und erhalten als unabhängige Lösungen der daraus resultierenden Differentialgleichungen (0.7) bzw (0.9) für $\varphi(y)$ die Besselfunktionen[1] 1. Art $J_{\frac{1}{3}}, J_{-\frac{1}{3}}$, definiert durch

$$J_\alpha(y) := \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!\Gamma(m+\alpha+1)} \left(\frac{y}{2}\right)^{2m+\alpha} \quad , \quad \alpha \in \mathbb{R} \tag{0.11}$$

[1] Beachte dass für $a \notin \mathbb{Z}$ die Besselfunktionen J_a, J_{-a} linear unabhängig sind und den gesamten Lösungsraum aufspannen.

im erlaubten Bereich $Ax + E \geq 0$ bzw. die modifizierten Besselfunktionen $I_{\frac{1}{3}}, K_{\frac{1}{3}}$ definiert durch

$$I_\alpha(y) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!\Gamma(m+\alpha+1)} \left(\frac{y}{2}\right)^{2m+\alpha} \tag{0.12}$$

$$\tag{0.13}$$

$$K_\alpha := \frac{\pi}{2} \cdot \frac{I_{-\alpha} - I_\alpha}{\sin(\alpha\pi)} \quad , \quad \alpha \in \mathbb{R} \tag{0.14}$$

im verbotenen Bereich $Ax + E < 0$. Die allgemeinen Lösungen der Schrödingergleichung ergeben sich dementsprechend als

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_l(x) := \sqrt[3]{y(x)} \cdot \left[L_1 I_{\frac{1}{3}}(y(x)) + L_2 K_{\frac{1}{3}}(y(x))\right] & : Ax + E < 0 \\ \\ \psi_r(x) := \sqrt[3]{y(x)} \cdot \left[R_1 J_{\frac{1}{3}}(y(x)) + R_2 J_{-\frac{1}{3}}(y(x))\right] & : Ax + E \geq 0 \end{cases} \tag{0.15}$$

Fordert man die **Normierbarkeit** der Wellenfunktion ψ, also insbesondere $\psi(x) \overset{x\to-\infty}{\longrightarrow} 0$, so muss wegen

$$I_{\frac{1}{3}}(y) \overset{y\to\infty}{\longrightarrow} \infty$$

auf jeden Fall $L_1 = 0$ sein.

Anschlussbedingungen

Fordert man die stetige Differenzierbarkeit der Lösung ψ auf $\mathbb{R}$, so muss gelten

$$\lim_{x\to-E/A} \psi_r(x) = \lim_{x\to-E/A} \psi_l(x) \tag{0.16}$$

und

$$\lim_{x\to-E/A} \partial_x\psi_r(x) = \lim_{x\to-E/A} \partial_x\psi_l(x) \tag{0.17}$$

Wegen

$$\lim_{y\to0^+} \sqrt[3]{y} \cdot I_{\frac{1}{3}}(y) = 0 \quad \wedge \quad \lim_{y\to0^+} \sqrt[3]{y} \cdot I_{-\frac{1}{3}} = \frac{\sqrt[3]{2}}{\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}$$

gilt

$$\lim_{x\to-E/A} \psi_l(x) = \lim_{y\to0^+} \sqrt[3]{y} \cdot L_2 \cdot K_{\frac{1}{3}}(y) = \frac{\pi}{\sqrt{3}} \cdot \frac{\sqrt[3]{2}}{\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)} \cdot L_2$$

und wegen

$$\lim_{y\to0^+} \sqrt[3]{y} \cdot J_{\frac{1}{3}}(y) = 0 \quad , \quad \lim_{y\to0^+} \sqrt[3]{y} \cdot J_{-\frac{1}{3}}(y) = \frac{\sqrt[3]{2}}{\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}$$

ähnlich

$$\lim_{x\to-E/A} \psi_r(x) = \frac{\sqrt[3]{2}}{\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)} \cdot R_2$$

Daher nach Anschlussbedingung (0.16)

$$R_2 = \frac{\pi}{\sqrt{3}} \cdot L_2 \tag{0.18}$$

Wegen

$$\partial_y \left[\sqrt[3]{y} \cdot I_{\frac{1}{3}}(y)\right] = \frac{\partial_y y^{\frac{2}{3}}}{\Gamma\left(\frac{4}{3}\right)\sqrt[3]{2}} + \mathcal{O}\left(y^{\frac{5}{3}}\right) \quad , \quad \partial_y \left[\sqrt[3]{y} \cdot I_{-\frac{1}{3}}(y)\right] = 0 + \mathcal{O}(y)$$

gilt

$$\partial_x\psi_l(x)\big|_{x=-E/A} = \underbrace{(\partial_x y)}_{\in\mathcal{O}\left(y^{\frac{1}{3}}\right)} \cdot \partial_y \left[\sqrt[3]{y} \cdot L_2 K_{\frac{1}{3}}(y)\right]\Bigg|_{y=0} = \frac{\pi L_2}{\sqrt{3} \cdot \Gamma\left(\frac{4}{3}\right)\sqrt[3]{2}} \cdot \underbrace{(\partial_x y) \cdot \left(\partial_y y^{\frac{2}{3}}\right)\big|_{y=0}}_{\in\mathbb{R}\setminus\{0\}}$$

und wegen

$$\partial_y \left[\sqrt[3]{y} \cdot J_{\frac{1}{3}}(y) \right] = \frac{\partial_y y^{\frac{2}{3}}}{\Gamma\left(\frac{4}{3}\right) \sqrt[3]{2}} + \mathcal{O}\left(y^{\frac{5}{3}}\right) \quad , \quad \partial_y \left[\sqrt[3]{y} \cdot J_{-\frac{1}{3}}(y) \right] = 0 + \mathcal{O}\left(y\right)$$

gilt

$$\partial_x \psi_r(x)\big|_{x=-E/A} = \underbrace{(\partial_x y)}_{\in \mathcal{O}\left(y^{\frac{1}{3}}\right)} \cdot \partial_y \left[\sqrt[3]{y} \cdot R_1 J_{\frac{1}{3}}(y) + \sqrt[3]{y} \cdot R_2 J_{-\frac{1}{3}}(y) \right] \Bigg|_{y=0} = \frac{R_1}{\Gamma\left(\frac{4}{3}\right) \sqrt[3]{2}} \cdot \underbrace{(\partial_x y) \cdot \left(\partial_y y^{\frac{2}{3}}\right) \big|_{y=0}}_{\in \mathbb{R} \setminus \{0\}}$$

Daher nach Anschlussbedingung (0.17)

$$R_1 = \frac{\pi}{\sqrt{3}} \cdot L_2 \tag{0.19}$$

Aus (0.15), (0.18) & (0.19) erhält man schließlich die (stetig differenzierbare, normierbare) Lösung der Schrödingergleichung

$$\boxed{\psi(x) = \begin{cases} C \cdot \sqrt{-Ax - E} \cdot K_{\frac{1}{3}} \left[\frac{\sqrt{8m}}{3A\hbar} (-Ax - E)^{\frac{3}{2}} \right] & : Ax + E < 0 \\ \frac{\pi C}{\sqrt{3}} \cdot \sqrt{Ax + E} \cdot \left\{ J_{\frac{1}{3}} \left[\frac{\sqrt{8m}}{3A\hbar} (Ax + E)^{\frac{3}{2}} \right] + J_{-\frac{1}{3}} \left[\frac{\sqrt{8m}}{3A\hbar} (Ax + E)^{\frac{3}{2}} \right] \right\} & : Ax + E \geq 0 \end{cases}} \tag{0.20}$$

für $C \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ (bis auf Normierung). Abbildung (0.1) zeigt den typischen Verlauf[2] der Lösung (0.20) für spezielle Parameter.

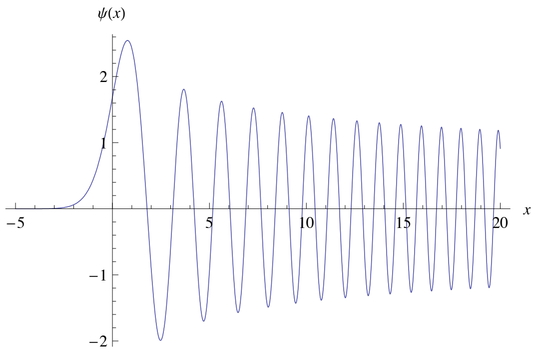

Figure 0.1: Verlauf der Lösung ψ für $C = A = 1$, $E = 0$ und $\sqrt{8m}/(3A\hbar) = 1$. Beachte den schnellen Abfall im verbotenen Bereich!

Bemerkungen:

(i) Für $x \geq -E/A$ sprich $y(x) = \sqrt{Ax + E}$ (klassisch erlaubter Bereich), verhalten sich beide $J_{\pm\frac{1}{3}}(y)$ oszillierend mit wachsendem y. Für $y \gg \left|\alpha^2 - 1/4\right|$ verhalten sich die Besselfunktionen wie

$$J_\alpha(y) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi y}} \cdot \cos\left(y - \frac{\alpha\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \tag{0.21}$$

und die Lößung $\psi(x)$ oszilliert für $x \to \infty$ mit gegen 0 abklingenden Amplituden (vgl. Abb. (0.1)).

(ii) Für $x < -E/A$ sprich $y(x) = \sqrt{-Ax - E}$ (klassisch verbotener Bereich) verhält sich $K_\alpha(y)$ asymptotisch wie

$$K_\alpha(y) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2y}} \cdot e^{-y} \quad , \quad y \to \infty$$

was einem exponentiellen Abfall der Wellenfunktion $\psi(x)$ für $x \to -\infty$ entspricht.

[2]Mathematica 6.0

(b) Die Lösung von (0.2), sprich

$$\partial_p\widetilde{\psi}(p) = \frac{i}{\hbar A}\left(E - \frac{p^2}{2m}\right)\cdot\widetilde{\psi}(p)$$

ergibt sich direkt als

$$\widetilde{\psi}(p) = C\cdot\exp\left[\frac{ip}{\hbar A}\left(E - \frac{p^2}{6m}\right)\right] \quad , \quad C\in\mathbb{C} \tag{0.22}$$

bzw. in Ortsdarstellung

$$\psi(x) \overset{(0.3)}{=} \frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\limits_{\mathbb{R}}\exp\left[\underbrace{\frac{i}{\hbar A}\left(Ep + Axp - \frac{p^3}{6m}\right)}_{\text{ungerade in } p}\right]\,dp = \frac{2C}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\limits_0^\infty\cos\left[\frac{i}{\hbar A}\left(Ep + Axp - \frac{p^3}{6m}\right)\right]\,dp$$

$$= 2C\pi\cdot\frac{\sqrt[3]{2m\hbar A}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\cdot\underbrace{\frac{1}{\pi}\cdot\int\limits_0^\infty\cos\left[-\sqrt[3]{\frac{2mA}{\hbar^2}}\cdot\left(x+\frac{E}{A}\right)\cdot u + \frac{u^3}{3}\right]\,du}_{\mathrm{Ai}\left(-\sqrt[3]{\frac{2mA}{\hbar^2}}\cdot\left(x+\frac{E}{A}\right)\right)}$$

$$= \mathrm{const}\cdot\mathrm{Ai}\left(-\sqrt[3]{\frac{2mA}{\hbar^2}}\cdot\left(x+\frac{E}{A}\right)\right)$$

mit der Airy-Funktion

$$\mathrm{Ai}(y) := \frac{1}{\pi}\int\limits_0^\infty\cos\left(yu + \frac{u^3}{3}\right)\,du \quad , \quad y\in\mathbb{R}$$