

Bachelorarbeit

# **Das Coulomb-Potential in der nichtrelativistischen höher-dimensionalen Quantenmechanik**

Daniel Schwartländer  
Matrikelnummer: 363646

Erstgutachter: Prof. Dr. Klasen  
Zweitgutachter: Prof Dr. Münster

20.5.2013

# Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung . . . . .	2
2	Grundlagen . . . . .	2
2.1	Kugelkoordinaten in beliebigen Dimensionen . . . . .	2
2.2	Drehimpulsoperator in beliebigen Dimensionen . . . . .	3
2.3	Laplaceoperator in beliebigen Dimensionen . . . . .	4
3	Coulomb-Potential . . . . .	5
3.1	Energiespektrum und Eigenzustände . . . . .	5
3.2	Leiteroperatoren . . . . .	10
3.3	Abbildung des Coulomb-Potentials auf den harmonischen Oszillator .	11
4	Yukawa-Potential . . . . .	13
4.1	Störungstheorie . . . . .	14
4.2	Reihenentwicklung der Zustände . . . . .	16
4.3	Rayleigh-Ritzsches Variationsverfahren . . . . .	17
4.4	Bestimmung der Energieeigenwerte aus dem Konvergenzverhalten .	21
4.5	Vergleich der Verfahren . . . . .	23
4.6	Diskussion der Dimensionsabhängigkeit . . . . .	25
5	Zusammenfassung . . . . .	29
6	Anhang . . . . .	31
6.1	Leiteroperatoren . . . . .	31

# 1 Einleitung

In dieser Arbeit sollen Systeme in beliebigen räumlichen Dimensionen in der nichtrelativistischen Quantenmechanik behandelt werden. Neben dem rein akademischen Interesse, warum wir in einem anscheinend dreidimensionalen Raum leben, beziehungsweise in wie fern sich der dreidimensionale Raum und die physikalischen Gesetze in 3 Dimensionen von den physikalischen Gesetzen und ihren Auswirkungen in beliebigen Dimensionen unterscheiden, existieren noch weitere Gründe sich mit der Quantenmechanik in beliebigen Dimensionen zu beschäftigen. Dimensionsreduzierte quantenmechanische Systeme wie das zweidimensionale Elektronengas werden in der Fest- und Oberflächenphysik als Modelle zur Beschreibung von Oberflächen, dünnen Schichten und Bandstrukturen, wie in [1] zusammengefasst, genutzt. Physikalische Modelle in höheren Dimensionen finden sich vor allem im Bereich der Physik jenseits des Standardmodells, aber auch in der Festkörperphysik existieren Ansätze [2]. Hier soll die Abhängigkeit der Energieeigenwerte zweier Potentiale von der Dimension behandelt werden. Das erste Potential ist das exakt lösbare Coulomb-Potential, das durch die Vorhersage des Spektrums des Wasserstoffatoms historisch bedeutend ist. Als Verallgemeinerung des Coulomb-Potential wird das Yukawa-Potential untersucht, das im dreidimensionalen zum Beispiel in der Atomphysik zur Vorhersage von Spektren neutraler Atome [3] genutzt wird. Im ersten Abschnitt werden zunächst die wichtigsten Grundlagen angegeben, die zur Behandlung von radialsymmetrischen Hamiltonoperatoren in beliebigen Dimensionen benötigt werden. Danach wird im zweiten Abschnitt das Coulomb-Potential diskutiert. Die Dimensionsabhängigkeit der Energieeigenwerte des Yukawa-Potentials wird im dritten Abschnitt untersucht.

## 2 Grundlagen

In diesem Abschnitt werden kurz die zur Verallgemeinerung von radialsymmetrischen Hamiltonoperatoren in beliebige Dimensionen benötigten Relationen zusammengefasst. Die Formeln stammen aus [4] und werden dort wesentlich ausführlicher diskutiert, weshalb für Herleitungen und mathematische Erläuterungen auch auf [4] verwiesen wird.

### 2.1 Kugelkoordinaten in beliebigen Dimensionen

Da das Coulomb-Potential und das Yukawa-Potential rotationssymmetrisch sind, ist es praktisch in Kugelkoordinaten zu arbeiten. Die Transformation von Kugelkoordinaten zu karte-

sischen Koordinaten in  $D$  Dimensionen kann durch

$$\begin{aligned}x_1 &= r \cos(\theta_1) \prod_{i=2}^{D-1} \sin(\theta_i) \\x_2 &= r \prod_{i=1}^{D-1} \sin(\theta_i) \\x_a &= r \cos(\theta_{a-1}) \prod_{i=a}^{D-1} \sin(\theta_i) \\x_D &= r \cos(\theta_{D-1})\end{aligned}$$

definiert werden, wobei  $a \in [3, D - 1]$ ,  $r \in [0, \infty)$ ,  $\theta_1 \in [-\pi, \pi]$  und  $\theta_b \in [0, \pi]$ ,  $b \in [2, D - 1]$  gelten.  $r = \sqrt{\sum_{i=1}^D x_i^2}$  ist der Radius einer  $D$  dimensionalen Kugel. Bezeichnet man  $r$  als  $\theta_0$ , sind die Normierungsfaktoren der Einheitsvektoren  $h_i = |\frac{\partial \vec{r}}{\partial \theta_i}|$   $i = 0, \dots, D - 1$  für  $D \geq 3$  durch

$$h_0 = 1 \tag{1}$$

$$h_1 = r \prod_{i=2}^{D-1} \sin(\theta_i) \tag{2}$$

$$h_2 = r \prod_{i=3}^{D-1} \sin(\theta_i) \tag{3}$$

$$h_a = r \prod_{i=a+1}^{D-1} \sin(\theta_i) \tag{4}$$

$$h_{D-1} = r \tag{5}$$

gegeben, während im Fall  $D = 2$   $h_0 = 1$  und  $h_1 = r$  gilt. Das Volumenelement berechnet sich aus

$$\prod_{i=1}^D dx_i = r^{D-1} dr d\Omega, \quad d\Omega = \prod_{j=1}^{D-1} [\sin(\theta_j)]^{j-1} d\theta_j. \tag{6}$$

## 2.2 Drehimpulsoperator in beliebigen Dimensionen

Die Drehimpulsoperatoren  $L_{ab}$  sind in kartesischen Koordinaten als ( $\hbar = 1$ )

$$L_{ab} = i \left( x_b \frac{\partial}{\partial x_a} - x_a \frac{\partial}{\partial x_b} \right) \tag{7}$$

definiert und sind die Generatoren der Gruppe  $SO(D)$ , wobei ihr Kommutator durch

$$[L_{ab}, L_{cd}] = i(\delta_{ac}L_{bd} + \delta_{bd}L_{ac} - \delta_{ad}L_{bc} - \delta_{bc}L_{ad}) \tag{8}$$

gegeben ist. Den Casimir Operator  $L^2$ , der mit allen Elementen der Gruppe vertauscht, erhält man aus der Summe aller Quadrate der Generatoren

$$L^2 = \sum_{a < b=2}^D L_{ab}^2 \quad (9)$$

und lautet in Kugelkoordinaten

$$L^2 = \sum_{j=1}^{D-2} \frac{1}{\prod_{k=j+1}^{D-1} \sin^2(\theta_k)} \left[ \frac{1}{\sin^{j-1}(\theta_j)} \left( \frac{\partial}{\partial \theta_j} \sin^{j-1}(\theta_j) \frac{\partial}{\partial \theta_j} \right) \right] \quad (10)$$

$$+ \frac{1}{r^2} \left[ \frac{1}{\sin^{D-1}(\theta_{D-1})} \left( \frac{\partial}{\partial \theta_{D-1}} \sin^{D-2}(\theta_{D-1}) \frac{\partial}{\partial \theta_{D-1}} \right) \right]. \quad (11)$$

Seine Eigenfunktionen  $Y_{l_{D-2} \dots l_1}^l(\theta_1 \dots \theta_{D-1})$  werden Kugelflächenfunktionen genannt und erfüllen die Eigenwertgleichung

$$L^2 Y_{l_{D-2} \dots l_1}^l(\theta_1 \dots \theta_{D-1}) = l(l + D - 2) Y_{l_{D-2} \dots l_1}^l(\theta_1 \dots \theta_{D-1}). \quad (12)$$

## 2.3 Laplaceoperator in beliebigen Dimensionen

Um später einen rotationssymmetrischen Hamiltonoperator in  $D$  dimensionalen Kugelkoordinaten darstellen zu können, muss zunächst der Laplace-Operator in beliebig dimensionalen Kugelkoordinaten betrachtet werden. Setzt man in die allgemeine Formel zur Berechnung des Laplace-Operators in einem anderen Koordinatensystemen mit den Koordinaten  $y_0, y_1, \dots, y_{D-1}$

$$\nabla^2 = \frac{1}{h} \sum_{j=0}^{D-1} \frac{\partial}{\partial y_j} \left( \frac{h}{h_j^2} \frac{\partial}{\partial y_j} \right) \quad (13)$$

$$\text{mit } h = \prod_{j=0}^{D-1} h_j, \quad h_j = \left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \theta_i} \right| \quad (14)$$

für  $y_0 = r$  und  $y_i = \theta_i, i \in [1, D-1]$  ein, erhält man mit (5)

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^{D-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^{D-1} \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad (15)$$

$$+ \frac{1}{r^2} \sum_{j=1}^{D-2} \frac{1}{\prod_{k=j+1}^{D-1} \sin^2(\theta_k)} \left[ \frac{1}{\sin^{j-1}(\theta_j)} \left( \frac{\partial}{\partial \theta_j} \sin^{j-1}(\theta_j) \frac{\partial}{\partial \theta_j} \right) \right] \quad (16)$$

$$+ \frac{1}{r^2} \left[ \frac{1}{\sin^{D-1}(\theta_{D-1})} \left( \frac{\partial}{\partial \theta_{D-1}} \sin^{D-2}(\theta_{D-1}) \frac{\partial}{\partial \theta_{D-1}} \right) \right]. \quad (17)$$

Durch Vergleich mit Gleichung (11) für den kommutierenden Drehimpulsoperator kann der Laplace-Operator als

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^{D-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^{D-1} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{r^2} \quad (18)$$

geschrieben werden.

### 3 Coulomb-Potential

Als Coulomb-Potential in beliebigen Dimensionen wird hier ein Potential der Form  $V(r) = \frac{\gamma}{r}$  angenommen. Die Lösung der Poissons-Gleichung in  $D$  Dimensionen ist hingegen

$$V^*(r) = \begin{cases} \frac{\gamma}{r^{D-2}}, & \text{wenn } D \neq 2 \\ \gamma \ln(r), & \text{wenn } D = 2 \end{cases} \quad (19)$$

und entspricht somit nur für  $D = 3$  dem gewählten Ansatz [5]. Es konnte in [6] gezeigt werden, dass für Atome mit einem Potential der Form  $V^*(r)$  für  $D > 3$  nur stabile Zustände existieren, deren Energien positiv sind und dass im Fall von  $D = 4$  keine stabilen Zustände existieren. Da dies der experimentellen Beobachtung widerspricht, scheint man die Gültigkeit des Gaußschen Gesetzes in höheren Dimensionen aufzugeben zu müssen. Das Potential  $V(r)$  entspricht hingegen den Beobachtungen der Rutherford-Streuexperimente, die unabhängig von der Anzahl der räumlichen Dimensionen sind [7]. Dies rechtfertigt den gewählten Ansatz der Form  $\frac{1}{r}$ . Für die Konstante  $\gamma$  gilt in 3 Dimensionen  $\gamma = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0}$ . Dabei sind  $q_1$  und  $q_2$  die Ladungen der beiden elektrisch wechselwirkenden Teilchen. Eine Verallgemeinerung dieser Konstanten auf beliebige Dimensionen soll hier nicht vorgenommen werden, da unklar ist in wie fern sich die Naturkonstanten in anderen Dimensionen verhalten beziehungsweise verhalten würden. Daher wird in den folgenden Abschnitten die Konstante nur als  $\gamma$  bezeichnet.

#### 3.1 Energiespektrum und Eigenzustände

Die Rechnungen in diesem Abschnitt erfolgen nach [5], [8] und [9], wenn nicht anders angegeben. Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung eines Wasserstoff ähnlichen Atoms ist durch

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi(\vec{x}) - \frac{\gamma}{r} \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x}) \quad (20)$$

gegeben, wobei  $\mu$  die reduzierte Masse ist. In folgenden Formeln wird  $\hbar = \mu = 1$  gesetzt und es werden nur die gebundenen Zustände mit  $E < 0$  betrachtet. Setzt man den Laplace-Operator in Kugelkoordinaten (18) für eine beliebige Anzahl an Dimensionen ein, ergibt sich

$$-\frac{1}{2} \left[ \frac{1}{r^{D-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^{D-1} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{r^2} \right] \psi(\vec{x}) = \left[ E + \frac{\gamma}{r} \right] \psi(\vec{x}). \quad (21)$$

Mit dem Separationsansatz  $\psi(\vec{x}) = R(r)Y_{l_{D-2}...l_1}^l(\theta_1, \dots, \theta_{D-1})$  erhält man die Eigenwertgleichung für den Winkelanteil

$$L^2 Y_{l_{D-2}...l_1}^l(\theta_1, \dots, \theta_{D-1}) = \Omega Y_{l_{D-2}...l_1}^l(\theta_1, \dots, \theta_{D-1}) \quad (22)$$

und die Differenzialgleichung

$$\frac{1}{r^{D-1}} \frac{d}{dr} \left( r^{D-1} \frac{d}{dr} \right) R(r) + \left( 2E + 2\frac{\gamma}{r} - \frac{\Omega}{r^2} \right) R(r) = 0 \quad (23)$$

für den Radialanteil.

## Winkelanteil

Die Lösung des Eigenwertproblems des Winkelanteils ist nach (12) gegeben durch

$$L^2 Y_{l_{D-2} \dots l_1}^l(\theta_1 \dots \theta_{D-1}) = l(l+D-2) Y_{l_{D-2} \dots l_1}^l(\theta_1 \dots \theta_{D-1}). \quad (24)$$

Für die Eigenwerte  $\Omega$  gilt damit

$$\Omega = l(l+D-2). \quad (25)$$

## Radialanteil

Mit (25) erhält man für den Radialanteil  $R_l(r)$  die Gleichung

$$\frac{d^2 R_l(r)}{dr^2} + \frac{D-1}{r} \frac{dR_l(r)}{dr} + \left( 2E + 2\frac{\gamma}{r} - \frac{l(l+D-2)}{r^2} \right) R_l(r) = 0, \quad (26)$$

die sich mit Hilfe der Substitution  $\rho = \sqrt{-8E}r$  und der Abkürzung  $\tau = \gamma \frac{1}{\sqrt{-2E}}$  als

$$\frac{d^2 R_l(\rho)}{d\rho^2} + \frac{D-1}{\rho} \frac{dR_l(\rho)}{d\rho} + \left( \frac{\tau}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+D-2)}{\rho^2} \right) R_l(\rho) = 0 \quad (27)$$

schreiben lässt. Um einen geeigneten Ansatz für die Lösung der Differentialgleichung zu finden, betrachtet man zunächst den Grenzfall  $\rho \rightarrow \infty$

$$\frac{d^2 R_l(\rho)}{d\rho^2} - \frac{1}{4} R_l(\rho) = 0. \quad (28)$$

Die Gleichung kann mit Hilfe des Ansatzes  $R_l(\rho) = const. \cdot e^{-\frac{\rho}{2}}$  gelöst werden. Wählt man den Ansatz

$$R_l(\rho) = \rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} F(\rho) \quad (29)$$

folgt für  $F(\rho)$  mit (27)

$$\rho \frac{d^2 F(\rho)}{d\rho^2} + (2l+D-1-\rho) \frac{dF(\rho)}{d\rho} + \left( \tau - l - \frac{D-1}{2} \right) F(\rho) = 0. \quad (30)$$

Diese Gleichung wird nun mit Hilfe der Sommerfeldschen Polynom Methode gelöst. Dazu wird für  $F(\rho)$  der Ansatz  $F(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$  verwendet und es folgt aus (30)

$$0 = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1} \rho^k (k+1)k + (2l+D-1) \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1} \rho^k (k+1) \quad (31)$$

$$- \sum_{k=1}^{\infty} a_k \rho^k k + \left( \tau - l - \frac{D-1}{2} \right) \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k. \quad (32)$$

Da die Potenzen von  $\rho$  voneinander linear unabhängig sind, führt man einen Koeffizientenvergleich durch und erhält die Rekursionsgleichung

$$a_{k+1} = \frac{k - (\tau - l - \frac{D-1}{2})}{(k+1)k + (2l+D-1)(k+1)} a_k, \quad (33)$$

wobei  $a_0 \neq 0$  gilt. Da die Zustände normierbar sein müssen, muss die Reihe für ein endliches  $k$  abbrechen. Die Abbruchbedingung für die Reihe ist somit

$$\tau - l - \frac{D-1}{2} = n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (34)$$

Analog zur Definition der Hauptquantenzahl des Wasserstoffatoms in 3 Dimensionen definiert man die Quantenzahl  $n = n_r + l + 1$ . Die Energie der Zustände kann nun mit (34) bestimmt werden, da  $\tau = \gamma \frac{1}{\sqrt{-2E}}$  abhängig von der Energie ist. Dies führt zu

$$n + \frac{D-3}{2} = \gamma \sqrt{\frac{1}{-2E}} \quad (35)$$

und die Energie ergibt sich somit aus

$$E(n, D) = -\frac{\gamma^2}{2(n + \frac{D-3}{2})^2}. \quad (36)$$

Die Energie ist somit abhängig von der Dimension  $D$ , aber unabhängig von der Quantenzahl  $l$ . Aus der Rekursionsrelation können die zugeordneten Laguerre Polynome  $L_n^\alpha(t)$  hergeleitet werden, die durch

$$L_n^\alpha = \sum_{j=0}^n \binom{n+\alpha}{n-j} \frac{(-t)^j}{j!} \quad (37)$$

gegeben sind. Insgesamt ist der Radialanteil somit durch

$$R(\rho) = N \rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n-l-1}^{2l+D-2}(\rho) \quad (38)$$

gegeben, wobei  $N$  die noch zu bestimmende Normierungskonstante ist. Sie wird mit (6) und mit  $\rho = \sqrt{-8E}$  durch die Relation

$$\int_0^\infty R(\rho)^2 r^{D-1} dr = \frac{N^2}{(-8E)^{\frac{D}{2}}} \int_0^\infty \rho^{D-1+2l} [L_{n-l-1}^{2l+D-2}(\rho)]^2 d\rho = 1 \quad (39)$$

bestimmt. Das Integral kann mit Hilfe der Integralformel

$$J_{m,\alpha}^\beta = \int_0^\infty e^{-x} x^{\alpha+\beta} [L_m^\alpha(x)]^2 \quad (40)$$

$$= \frac{\Gamma(\alpha+m+1)}{m!} \sum_{k=0}^m \frac{(-1)^k \Gamma(m-k-\beta) \Gamma(\alpha+k+\beta+1)}{\Gamma(-k-\beta) \Gamma(\alpha+k+1) k! (m-k)!} \quad \text{mit } \operatorname{Re}(\alpha+\beta+1) > 0 \quad (41)$$

gelöst werden [10]. Aus Gleichung (39) folgt  $\beta = 1$  und die Integralformel vereinfacht sich zu [11]

$$J_{m,\alpha}^1 = \frac{(2m + \alpha + 1)\Gamma(\alpha + m + 1)}{m!}. \quad (42)$$

Durch die Relationen (39), (42),  $m = n - l - 1$  und  $\alpha = 2l + D - 2$  erhält man

$$\frac{N^2}{(-8E)^{\frac{D}{2}}} \frac{(2n + D - 3)\Gamma(l + D + n - 2)}{(n - l - 1)!} = 1, \quad (43)$$

woraus mit (36) die Normierungskonstante folgt

$$N = \left( \frac{4\gamma}{2n + D - 3} \right)^{\frac{D}{2}} \sqrt{\frac{(n - l - 1)!}{(2n + D - 3)\Gamma(l + D + n - 2)}}. \quad (44)$$

Insgesamt lautet die Wellenfunktion des Coulombproblems

$$\psi(\vec{x}) = N\rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n-l-1}^{2l+D-2}(\rho) Y_{l_{D-2} \dots l_1}^l(\theta_1 \dots \theta_{D-1}). \quad (45)$$

## Abhängigkeit der Bindungsenergie von der Dimension

Anhand von (36) wird nun die Abhängigkeit der Energieniveaus von der Dimension diskutiert. In allen Dimensionen wird der Abstand der Energien mit steigendem  $n$  immer kleiner und nähert sich null an, wie es schon vom Wasserstoffatom in drei Dimensionen bekannt ist. Die Energien aller Zustände werden mit zunehmender Dimension immer größer, sodass das Elektron immer schwächer gebunden ist. Generell entspricht die Bindungsenergie eines Systems mit der Dimension  $D$  und der Hauptquantenzahl  $n$  einem System mit einer höheren Dimension  $D + 2$  und einer niedrigeren Hauptquantenzahl  $n - 1$ . In der Abbildung (1) werden die Grundzustandsenergie  $E_1 = \frac{-2B^2}{(D-1)^2}$  und die Energie des ersten angeregten Zustandes  $E_2 = \frac{-2B^2}{(D+1)^2}$  in Abhängigkeit von der Dimension dargestellt. Eine Besonderheit ist der eindimensionale Fall, bei dem die Grundzustandsenergie  $-\infty$  wird. Der Quotient der Grundzustandsenergie und der Energie des zweiten angeregten Zustands  $\frac{E_2}{E_1} = \frac{(D-1)^2}{(D+1)^2}$  ist auch dimensionsabhängig und nimmt mit steigender Dimension zu. Während für  $D = 2$  die Energie des zweiten Zustands  $E_2$  nur 11.11% der Grundzustandsenergie beträgt, sind es für  $D = 4$  schon 36%.

Auch die Form der Wellenfunktion und damit die Wahrscheinlichkeitsdichte sind von der Dimension abhängig. Abbildung 2 zeigt für den Grundzustand die Wahrscheinlichkeitsdichte  $|R(r)|^2$  des Radialteils in Abhängigkeit von dem Radius. Da die Kugelflächenfunktion und damit der Winkelanteil für  $n = 1$  konstant ist, wird die Wahrscheinlichkeitsdichte bis auf einen konstanten Faktor durch den Radialteil bestimmt. Auffällig ist dabei, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte am Kern mit zunehmender Dimension abnimmt. Insgesamt beeinflusst somit die Dimension eines Coulomb-Problems nicht nur die Energie der einzelnen Zustände sondern auch den Abstand zwischen den Energien und die Wahrscheinlichkeitsdichte.

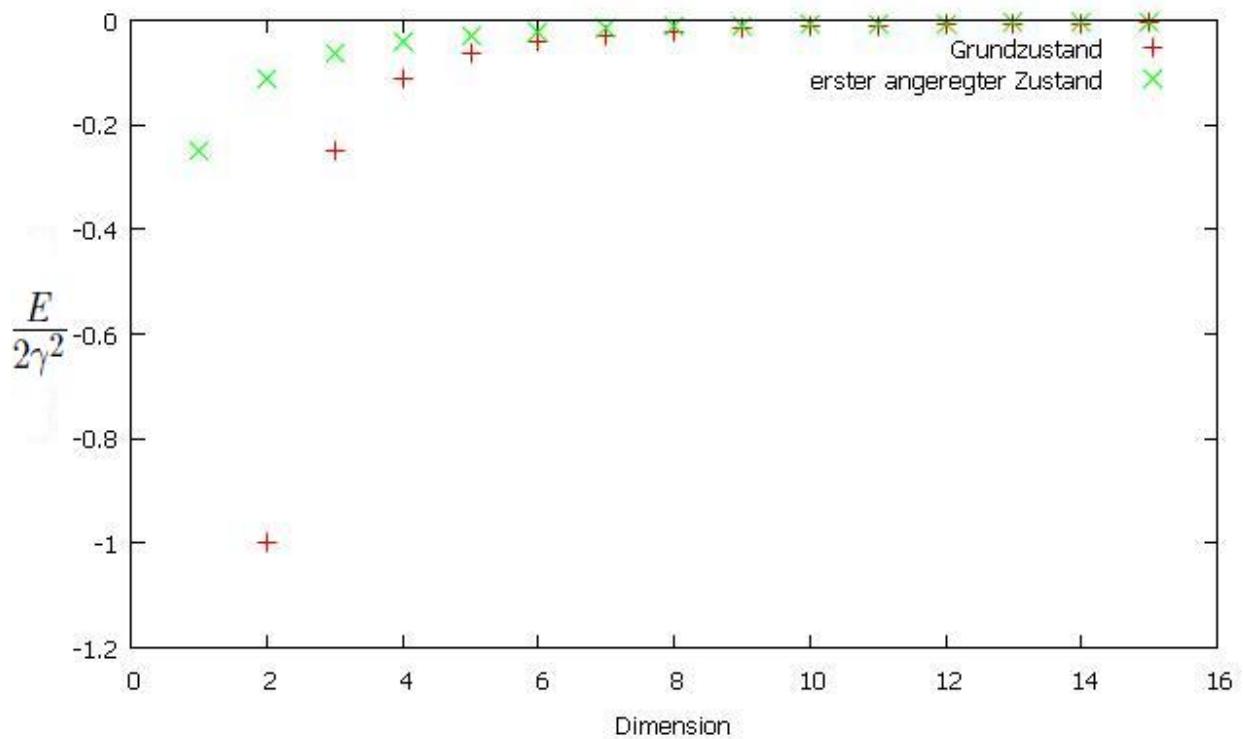


Abbildung 1: Grundzustandsenergie und Energie des ersten angeregten Zustands

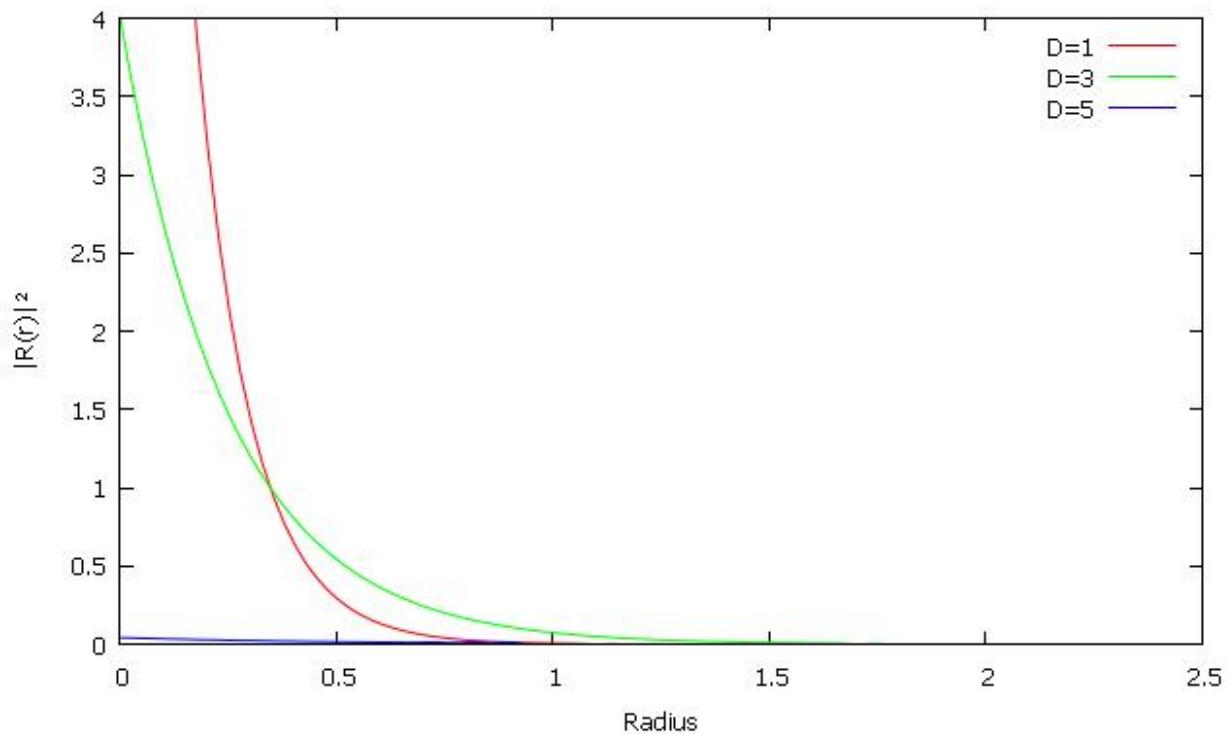


Abbildung 2: Wahrscheinlichkeitsdichte in Abhangigkeit von  $r$

## 3.2 Leiteroperatoren

In diesem Abschnitt werden die Auf- und Absteigeoperatoren für den Radialteil der Wellenfunktion  $R_{l,n}(\rho) = N\rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n-l-1}^{2l+D-2}(\rho)$  aufgestellt. Die Herleitung und Argumentation erfolgt dabei nach [5] und [12]. Die radiale Wellenfunktion hängt von den beiden Quantenzahlen  $n$  und  $l$  ab, wobei das Auffinden von Leiteroperatoren für  $n$  schwierig ist, da  $\rho$  aufgrund seiner Definition  $\rho = \sqrt{-8E}r$  von der Energie und damit auch von  $n$  abhängt. Deshalb müssen wir annehmen, dass für den Aufsteigeoperator

$$\hat{M}_n^+ R_{n,l}(\rho_n) = C_{n,l} R_{n+1,l}(\rho_n) \neq C_{n,l} R_{n+1,l}(\rho_{n+1}) \quad (46)$$

gilt, sodass ein Leiteroperator gefunden werden muss, der  $\rho_n$  zu  $\rho_{n+1}$  macht. Dieses komplizierte Problem soll hier nicht behandelt werden. Stattdessen werden die Leiteroperatoren für die Quantenzahl  $l$  untersucht, da  $\rho$  nicht von dieser abhängt. Um diese Operatoren zu finden, wird wegen (38) eine Relation zwischen den Laguerrepolynomen  $L_n^\alpha$  und  $L_{n-1}^{\alpha+2}$  für den Aufsteigeoperator und eine Relation zwischen  $L_n^\alpha$  und  $L_{n+1}^{\alpha-2}$  für den Absteigeoperator benötigt. Die erste Relation ist durch

$$\frac{d}{dy} L_n^\alpha(y) = -\frac{1}{\alpha+1} [y L_{n-1}^{\alpha+2}(y) + n L_n^\alpha(y)] \quad (47)$$

gegeben[13]. Bildet man nun die Ableitung von  $R_{n,l}$

$$\frac{d}{d\rho} R_{n,l}(\rho) = \left( \frac{l}{\rho} - \frac{1}{2} \right) R_{n,l}(\rho) + N_{n,l} \rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} \frac{d}{d\rho} L_{n-l-1}^{2l+D-2}(\rho) \quad (48)$$

und setzt (47) sowie (38) ein ergibt sich

$$\left( \frac{d}{d\rho} - \frac{l}{\rho} + \frac{1}{2} \left( \frac{2n+D-3}{2l+D-1} \right) \right) R_{n,l}(\rho) = \frac{-1}{2l+D-1} \frac{N_{n,l}}{N_{n,l+1}} R_{n,l+1}(\rho). \quad (49)$$

Daraus folgt die Beziehung

$$\hat{M}_l^+ R_{n,l}(\rho) = m_l^+ R_{n,l+1}(\rho) \quad (50)$$

mit der Definition des Aufsteigeoperators

$$\hat{M}_l^+ = -\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} - \frac{1}{2} \left( \frac{2n+D-3}{2l+D-1} \right) \quad (51)$$

und

$$m_l^+ = \frac{\sqrt{(n-l-1)(n+l+D-2)}}{2l+D-1}. \quad (52)$$

Um den Absteigeoperator zu finden, wird zunächst die benötigte Relation zwischen den Laguerrepolynomen gesucht. Die Formel

$$(n+1)(n+\alpha) L_{n+1}^{\alpha-2}(y) = [\alpha(\alpha-1) - y(\alpha+n)] L_n^\alpha(y) + (\alpha-1)y \frac{d}{dy} L_n^\alpha(y), \quad (53)$$

deren Herleitung im Anhang näher erläutert wird, kann zu

$$(\alpha - 1) \frac{d}{dy} L_n^\alpha(y) = \left[ (\alpha + n) - \frac{\alpha(\alpha - 1)}{y} \right] L_n^\alpha(y) + \frac{(n + 1)(n + \alpha)}{y} L_{n+1}^{\alpha-2} \quad (54)$$

umgeformt werden. Setzt man diese Gleichung in (48) ein, erhält man

$$\left( \frac{d}{d\rho} + \frac{l + D - 2}{\rho} - \frac{1}{2} \left( \frac{2n + D - 3}{2l + D - 3} \right) \right) R_{n,l}(\rho) = \frac{(n - l)(n + l + D - 3)}{2l + D - 3} \frac{N_{n,l}}{N_{n,l-1}} R_{n,l-1}, \quad (55)$$

was die Definition

$$\hat{M}_l^- = \frac{d}{d\rho} + \frac{l + D - 2}{\rho} - \frac{1}{2} \left( \frac{2n + D - 3}{2l + D - 3} \right) \quad (56)$$

für den Absteigeoperator nahe legt. Insgesamt folgt daraus mit

$$m_l^- = \frac{\sqrt{(n - l)(n + l + D - 3)}}{2l + D - 3} \quad (57)$$

die Gleichung

$$\hat{M}_l^- R_{n,l}(\rho) = m_l^- R_{n,l-1}(\rho). \quad (58)$$

### 3.3 Abbildung des Coulomb-Potentials auf den harmonischen Oszillator

In diesem Abschnitt wird die Radialfunktion des Coulombproblems auf die Radialfunktion des harmonischen Oszillators abgebildet. Der harmonische Oszillator der Masse  $m$  in  $d$  Dimensionen besitzt ein Potential der Form

$$V(r) = \frac{m\omega^2}{2} r^2 \quad (59)$$

und die radiale Differentialgleichung lautet daher ( $\hbar = m = 1$ )[14]

$$\frac{d^2}{dy^2} R_L(y) + \frac{d - 1}{y} \frac{d}{dy} R_L(y) + \left[ -y^2 - \frac{L(L + d - 2)}{y^2} + K \right] R_L = 0, \quad (60)$$

wobei  $y = r\sqrt{\omega}$ ,  $K = 2N + d$  und für die Quantenzahlen  $N$  und  $L$   $N \geq L$  gilt. Die Energieniveaus sind durch

$$E_N = \frac{\omega K}{2} = \frac{\omega}{2}(2N + d) \quad (61)$$

und die Eigenfunktionen sind durch

$$R_L(y) = N e^{-\frac{y^2}{2}} y^L L_{\frac{N-L}{2}}^{L-1+\frac{d}{2}}(y^2) \quad (62)$$

mit der Normierungskonstanten

$$N = \omega^{-\frac{d}{4}} \sqrt{\frac{2\Gamma[\frac{N-L}{2} + 1]}{\Gamma[\frac{N+L+D}{2}]}} \quad (63)$$

gegeben [15]. Mit der Substitution  $\rho = y^2$  kann (38) in (62) überführt werden. Dabei ergeben sich für die Quantenzahlen  $N, n, L$  und  $l$  und die Dimensionen  $D$  und  $d$  der beiden Systeme aufgrund des Exponenten von  $\rho$  und der Indizes der Laguerre Polynome die Relationen [14]

$$L = 2l, \quad N = 2n - 2, \quad \text{und} \quad d = 2D - 2. \quad (64)$$

Zwischen den Lösungen des Radialproblems beider Systeme besteht somit die Beziehung [15]

$$R_l(\rho, D, n, l) = \Lambda_0 R_L(y, 2D - 2, 2n - 2, 2l) \quad (65)$$

mit

$$\Lambda_0 = \frac{1}{2} \omega^{\frac{2D-2}{4}} \sqrt{\frac{(2\gamma)^D}{(n + \frac{D-3}{2})^{D-1}}}. \quad (66)$$

Aus (64) folgt, dass alle Eigenzustände eines  $D$  dimensionalen Coulombproblems mit  $n \geq 1$  und  $l \geq 0$  auf Eigenzustände eines harmonischen Oszillators abgebildet werden können, solange  $D > 1$  ist. Die Abbildung kann weiter verallgemeinert werden. Dazu wird (65) um einen zusätzlichen Faktor ergänzt [15]

$$R_l(\rho, D, n, l) = \Lambda_\lambda y^{-\lambda} R_L(y, d, N, L). \quad (67)$$

Aufgrund des zusätzlichen Faktors  $y^{-\lambda}$  muss  $R_L(y, d, N, L)$  den Faktor  $y^{L+\lambda}$  enthalten, sodass  $L$  zu  $L + \lambda$  wird. Damit die Indizes der Laguerre Polynome sich nicht verändern, muss  $N$  durch  $N + \lambda$  und  $d$  durch  $d - 2\lambda$  ersetzt werden. Für die Quantenzahlen und Dimensionen gelten nun die Relationen

$$L = 2l + \lambda, \quad N = 2n - 2 + \lambda, \quad \text{und} \quad d = 2D - 2 - 2\lambda, \quad (68)$$

während für den Radialteil der Wellenfunktion

$$R_l(\rho, D, n, l) = \Lambda_0 y^{-\lambda} R_L(y, 2D - 2 - 2\lambda, 2n - 2 + \lambda, 2l + \lambda) \quad (69)$$

gilt [15]. Da  $L, l, d, D, n$  und  $N$  ganze Zahlen sind, muss auch  $\lambda$  eine ganze Zahl sein. Die physikalischen Beschränkungen  $N \geq 0$ ,  $L \geq 0$  und  $d \geq 1$  führen zu  $\lambda \geq 2 - 2n$ ,  $\lambda \geq -2l$  und  $\lambda \leq D - 2$ . Möchte man alle möglichen Eigenzustände abbilden und berücksichtigt man auch  $l \geq 0$  und  $n \geq 1$ , muss  $\lambda$  die Beziehung

$$0 \leq \lambda \leq D - 2 \quad (70)$$

erfüllen [15].

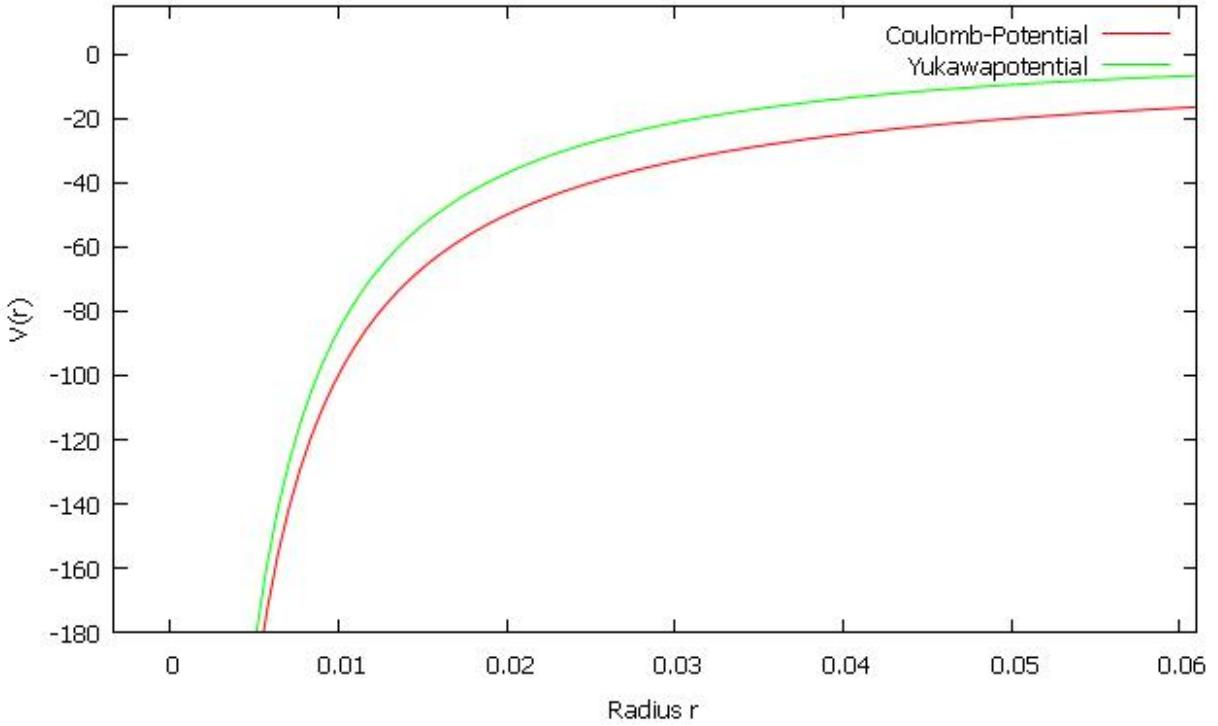


Abbildung 3: Coulomb-Potential und Yukawa-Potential mit  $B = 1$  und  $\mu = 15$

## 4 Yukawa-Potential

Nun soll das Coulombproblem verallgemeinert werden, indem das Yukawa-Potential

$$V(r) = -B \frac{e^{-\mu r}}{r} \quad \mu \geq 0 \quad (71)$$

betrachtet wird. Das Yukawa-Potential geht für den Grenzfall  $\mu \rightarrow 0$  in das Coulomb-Potential über und kann als abgeschirmtes Coulomb-Potential aufgefasst werden, sodass für das Yukawa-Potential Energieeigenwerte erwartet werden, die größer sind als die des Coulomb-Potentials. Wie in Abbildung (3) gezeigt, nähert sich das Yukawa-Potential dem Coulomb-Potential für kleine  $r$  an, während es für einen größeren Abstand zum Mittelpunkt schneller als das Coulomb-Potential gegen null geht.

Setzt man die Reihen-Definition der Exponentialfunktion  $e^{\mu r} = \sum_{x=0}^{\infty} \frac{(-\mu r)^x}{x!}$  ein, hat das Potential die Form

$$V(r) = -\frac{B}{r} + \mu B - \frac{B\mu^2 r}{2} + \dots \quad (72)$$

Die ersten beiden Terme sind somit nichts anderes als ein energetisch um  $\mu B$  verschobenes Coulombproblem, wobei die Bindungsenergie verringert wird. Für sehr kleine  $\mu$  sollte somit die dimensionsunabhängige Energieverschiebung dominieren und sich das System ähnlich wie das Wasserstoffatom verhalten. Das Yukawa-Potential ist wie das Coulomb-Potential radialsymmetrisch, wobei die Störung die zufällige  $l$  Entartung aufheben sollte, sodass die

Energieeigenwerte nun auch von der Quantenzahl  $l$  abhängen.

Im nächsten Abschnitt wird zunächst mit Hilfe der Störungstheorie das grundsätzliche Verhalten der Grundzustandsenergie des Yukawa-Potentials für kleine  $\mu$  untersucht. Anschließend wird durch Variationsrechnung auch das Verhalten für größere  $\mu$  betrachtet, bevor die Energien durch eine Konvergenzbetrachtung der Reihenentwicklung der Zustände genauer diskutiert und die verschiedenen Verfahren miteinander verglichen werden. Der eindimensionale Fall kann hier aufgrund der unendlichen Grundzustandsenergie des Coulomb-Potentials nicht betrachtet werden.

## 4.1 Störungstheorie

Für das Yukawa-Potential wird als erstes die Grundzustandsenergie  $E_0$  mit Hilfe der Störungstheorie berechnet. Dazu wird angenommen, dass  $\mu$  und damit die Störung klein ist, was im Hinblick auf (72) gerechtfertigt scheint. Das Yukawa-Potential erhält die Form

$$V(r) = -B \left[ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mu^n}{n!} (-1)^n r^{n-1} \right] = -\frac{B}{r} - B \left[ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mu^n}{n!} (-1)^n r^{n-1} \right], \quad (73)$$

wenn die Reihendarstellung der Exponentialfunktion eingesetzt wird. Das ungestörte System mit  $H_0 = -\frac{B}{r}$  und  $E_1 = -\frac{2B^2}{(D-1)^2}$  ist das schon gelöste Coulombproblem mit  $\gamma = B$  und die Störung  $H_1$  lautet daher

$$H_1 = -B \left[ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mu^n}{n!} (-1)^n r^{n-1} \right]. \quad (74)$$

Die Energie des gestörten Grundzustands  $E_0$  ist nach der Störungstheorie zweiter Ordnung durch [16]

$$E_0 = \frac{-2B^2}{(D-1)^2} + E_1^{(1)} + E_1^{(2)} \quad (75)$$

gegeben. Da der Grundzustand des Coulombproblems mit den Quantenzahlen  $n = 1$ ,  $l = 0$  und  $m = 0$  nicht entartet ist, ergibt sich die erste Ordnung der Energiekorrektur aus

$$E_1^{(1)} = \langle 100 | H_1 | 100 \rangle, \quad (76)$$

wobei der Grundzustand des Wasserstoffproblems durch  $|100\rangle = N e^{-br} Y_0$  mit  $b = \sqrt{-2E_1}$  gegeben ist. Setzt man (74) in (76) ein errechnet sich die erste Energiekorrektur durch

$$E_1^{(1)} = -BN^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mu^n}{n!} (-1)^n \int_0^{\infty} e^{-2br} r^{n-2+D} dr. \quad (77)$$

Dabei wurde genutzt, dass die Kugelflächenfunktionen normiert sind und deshalb  $\int Y_0^2 d\Omega = 1$  gilt. Das Integral wird mit  $\int_0^{\infty} x^n e^{-cx} dx = \frac{n!}{c^{n+1}}$  gelöst, wobei  $c > 0$  und  $n \geq 0$  gelten muss.

Es müssen keine Einschränkungen vorgenommen werden, da Fälle in denen  $D \geq 1$  und  $b > 0$  nicht gelten, physikalisch nicht sinnvoll sind. Somit folgt

$$E_1^{(1)} = -BN^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mu^n}{n!} (-1)^n \frac{(n-2+D)!}{(2b)^{n-1+D}}, \quad (78)$$

was sich mit (39) und (36) zu

$$E_1^{(1)} = -\frac{B}{(D-1)!} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mu^n}{n!} (-1)^n \frac{(D-1)^{n-1}(n-2+D)!}{(4B)^{n-1}} \quad (79)$$

vereinfacht. Die erste Energiekorrektur ist somit abhängig von den Parametern  $B$  und  $\mu$ , sowie von der Dimension. Der für kleine  $\mu$  dominante erste Term verringert die Bindungsenergie und ist proportional zu  $B$  und  $\mu$ , was der Erwartung durch (72) entspricht. Die Energiekorrektur zweiter Ordnung ist

$$E_1^{(2)} = \sum_{m \neq 1} \frac{|\langle m l_m m_m | H_1 | 100 \rangle|^2}{E_1 - E_m} = \sum_{m=2}^{\infty} \frac{|\langle m l_m m_m | H_1 | 100 \rangle|^2}{\frac{B^2}{2(m+\frac{D-3}{2})^2} - \frac{2B^2}{(D-1)^2}}. \quad (80)$$

Aufgrund der Orthogonalität der Kugelflächenfunktionen beschränkt sich die Summe auf Zustände mit  $l_m = 0$  und  $m_m = 0$ . Das Matrixelement lautet mit (37) explizit

$$\begin{aligned} \langle m l_m m_m | H_1 | 100 \rangle = \\ -BN_{m,l=0}N_{1,0} \int_0^{\infty} e^{-2A_m r} \left[ \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{j=0}^{m-1} \frac{\mu^n}{n!} (-1)^{n+j} \frac{(m-3+D)! (\frac{2B}{m+\frac{D-3}{2}})^j}{(m-j-1)!(D-2+j)!} \frac{r^{j+n-1}}{j!} \right] r^{D-1} dr \end{aligned} \quad (82)$$

mit

$$A_m = \frac{2B}{D-1} + \frac{B}{m+\frac{D-3}{2}}. \quad (83)$$

Dies lässt sich zu

$$\langle m l_m m_m | H_1 | 100 \rangle = \quad (84)$$

$$-BC_m \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{j=0}^{m-1} \frac{\mu^n}{n!} (-1)^{n+j} \frac{(m-3+D)! (\frac{2B}{m+\frac{D-3}{2}})^j}{(m-j-1)!(D-2+j)!} \frac{(j+n+D-2)!}{j!(2A_m)^{j+n+D-1}} \quad (85)$$

auflösen, wobei  $C_m$  die Abkürzung für

$$C_m = \frac{(4B)^D}{\sqrt{(D-1)!((D-1)(2m+D-3))^{\frac{D}{2}}}} \sqrt{\frac{(m-1)!}{(2m+D-3)(D+m-3)!}} \quad (86)$$

ist. Um die Dimensionsabhängigkeit des Yukawa-Potentials zu diskutieren scheint die Störungstheorie nicht gut geeignet zu sein, da der erste dominierende Term  $B\mu$  dimensionsunabhängig

ist und man anhand der nachfolgenden Summanden erkennen kann, dass der Einfluss der Dimension erst mit größerem  $\mu$  auf die Energie zunimmt. Die Störungstheorie zweiter Ordnung liefert nur eine sehr geringe Energiekorrektur von der Größenordnung  $10^{-14}$  bis  $10^{-8}$ , die mit  $\mu$  zunimmt und wesentlich kleiner ist als die Korrektur erster Ordnung. Da nicht sicher ist, in welchem Wertebereich von  $\mu$  die Störungstheorie brauchbare obere Schranken für die Grundzustandsenergie liefert, werden die Energiedifferenzen noch mit zwei weiteren Verfahren bestimmt und die Werte anschließend in den Tabellen (1), (2), (3) und (4) miteinander verglichen. Die Energien werden hier mit Hilfe der ersten 100 Summanden bestimmt. Die Rechnung wird dabei numerisch durch die schnell anwachsenden Fakultäten begrenzt, wobei die größten Fakultäten in den meisten Fällen in den vernachlässigbar kleinen Summanden mit großen  $n$  beziehungsweise  $m$  enthalten sind.

## 4.2 Reihenentwicklung der Zustände

In diesem Abschnitt wird eine Reihenentwicklung der exakten Zustände für das Yukawa-Potential aufgestellt. Da das Yukawa-Potential, genauso wie das Coulomb-Potential, radial-symmetrisch ist, kann man den Separationsansatz  $\psi(\vec{x}) = R(r)Y_{l_{D-2} \dots l_1}^l(\theta_1, \dots, \theta_{D-1})$  für die Wellenfunktion anwenden. Die Rechnung erfolgt somit zunächst analog zu der Rechnung des Coulombproblems, wobei  $\gamma = Be^{-\mu r}$  gesetzt wird. Die Gleichung (30) lautet dann

$$\rho \frac{d^2 F(\rho)}{d\rho^2} + (2l + D - 1 - \rho) \frac{dF(\rho)}{d\rho} + (\beta e^{-\alpha\rho} - l - \frac{D-1}{2})F(\rho) = 0, \quad (87)$$

wobei die Abkürzungen  $\beta = \frac{B}{\sqrt{-2E}}$  und  $\alpha = \frac{\mu}{\sqrt{-8E}}$  benutzt werden. Der Radialteil ist durch

$$R_l(\rho) = \rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} F(\rho) \quad (88)$$

gegeben und wird wieder mit Hilfe der Sommerfeldschen Polynom Methode gelöst. Mit dem Ansatz  $F(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$  und Reihen-Definition der Exponentialfunktion  $e^{-\mu r} = \sum_{x=0}^{\infty} \frac{(-\mu r)^x}{x!}$  erhält man

$$0 = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1} \rho^k (k+1)k + (2l + D - 1) \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1} \rho^k (k+1) - \sum_{k=1}^{\infty} a_k \rho^k k \quad (89)$$

$$- (l + \frac{D-1}{2}) \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k + \beta \left( \sum_{x=0}^{\infty} \frac{(-\alpha\rho)^x}{x!} \right) \left( \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \right). \quad (90)$$

Da die Potenzen von  $\rho$  untereinander linear unabhängig sind, muss die Gleichung

$$0 = a_{k+1}(k+1)k + (2l + D - 1)a_{k+1}(k+1) - a_k k \quad (91)$$

$$- (l + \frac{D-1}{2})a_k + \beta \left( \sum_{x=0}^k a_{k-x} (-1)^x \frac{\alpha^x}{x!} \right) \quad (92)$$

gelten. Daraus folgt die Rekursionsrelation

$$a_{k+1} = \frac{(k+l+\frac{D-1}{2}-\beta)a_k - \beta \left( \sum_{x=1}^k a_{k-x} (-1)^x \frac{\alpha^x}{x!} \right)}{(k+1)(2l+D-1+k)} \quad (93)$$

mit  $a_0 \neq 0$ , deren erster Teil genau der Rekursionsrelation des Coulombproblems (33) entspricht. Die unnormierten Wellenfunktionen des Yukawa-Potentials sind somit durch

$$\psi(\vec{x}) = Y_{l_{D-2} \dots l_1}^l(\theta_1 \dots \theta_{D-1}) \rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \quad (94)$$

gegeben. Die Zustände des Yukawa- und des Coulomb-Potentials unterscheiden sich somit nur durch die Rekursionsrelation für die Koeffizienten  $a_k$ . Führt man den Parameter  $b = \sqrt{-2E}$  ein, lautet die Rekursionsrelation

$$a_{k+1} = \frac{[2b(k+l+\frac{D-1}{2}) - 2B]a_k - 2B(\sum_{x=1}^k a_{k-x}(-1)^x \frac{\mu^x}{x!})}{(k+1)(2l+D-1+k)} \quad (95)$$

und die unnormierte Wellenfunktion

$$\psi(\vec{x}) = Y_{l_{D-2} \dots l_1}^l(\theta_1 \dots \theta_{D-1}) r^l e^{-br} \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^k. \quad (96)$$

Der vom Coulombproblem abweichende Term  $-2B(\sum_{x=1}^k a_{k-x}(-1)^x \frac{\mu^x}{x!})$  der Rekursionsrelation nimmt wie erwartet mit der Größe von  $B$  und  $\mu$  zu.

Da die Kugelflächenfunktionen bereits normiert sind, muss nur noch der Radialteil normiert werden. Die Normierung  $N$  ergibt sich dann aus

$$N^2 \int_0^{\infty} \rho^{2l} e^{-2br} \left[ \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} a_k a_i r^{2l+k+i+D-1} \right] r^{D-1} dr. \quad (97)$$

Das Integral lässt sich mit der schon zuvor genutzten Formel  $\int_0^{\infty} x^n e^{-cx} dx = \frac{n!}{c^{n+1}}$  lösen, sodass die Normierung durch

$$N = \left( \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} a_k a_i \frac{(2l+k+i+D-1)!}{(2b)^{2l+k+i+D}} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (98)$$

gegeben ist.

### 4.3 Rayleigh-Ritzsches Variationsverfahren

Da eine Reihenentwicklung für die exakten Zustände vorliegt, wird nun mit dem Variationsverfahren eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie  $E_0$  gesucht [17]

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi(b) | H | \psi(b) \rangle}{\langle \psi(b) | \psi(b) \rangle}, \quad (99)$$

wobei als Testfunktion eine nach  $N$  Summanden abgebrochene Reihenentwicklung der exakten Zustände (94) genutzt wird. Als Variationsparameter dient  $b = \sqrt{-2E}$  und es wird

angenommen, dass für den Grundzustand analog zum Coulombproblem  $l = 0$  gilt. Der Testzustand lautet dann

$$\psi(b) = Y_0(\theta_1 \dots \theta_{D-1}) e^{-br} \sum_{k=0}^N a_k r^k. \quad (100)$$

Für  $N = 0$  entspricht dieser Testzustand dem Grundzustand des Coulomb-Potentials. Das Matrixelement  $\langle \psi(b) | H | \psi(b) \rangle$  vereinfacht sich aufgrund von  $l = 0$  zu

$$\langle \psi(b) | H | \psi(b) \rangle = -\frac{1}{2} \langle \psi(b) | \nabla^2 | \psi(b) \rangle + \langle \psi(b) | V(r) | \psi(b) \rangle \quad (101)$$

$$= -\frac{1}{2} \langle \psi(b) | \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{D-1}{2} \frac{\partial}{\partial r} | \psi(b) \rangle - B \langle \psi(b) | \frac{e^{-\mu r}}{r} | \psi(b) \rangle. \quad (102)$$

Setzt man nun die Testzustände explizit ein erhält man

$$\langle \psi(b) | H | \psi(b) \rangle = -\frac{b^2}{2} \int_0^\infty e^{-2br} \left[ \sum_{n=0}^N \sum_{k=0}^N a_k a_n r^{n+k} \right] r^{D-1} dr \int Y_0^2 d\Omega \quad (103)$$

$$+ b \int_0^\infty e^{-2br} \left[ \sum_{n=0}^N \sum_{k=0}^N a_k a_n r^{n+k-1} n \right] r^{D-1} dr \int Y_0^2 d\Omega \quad (104)$$

$$- \frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-2br} \left[ \sum_{n=0}^N \sum_{k=0}^N a_k a_n r^{n+k-2} n(n-1) \right] r^{D-1} dr \int Y_0^2 d\Omega \quad (105)$$

$$+ \frac{D-1}{2} b \int_0^\infty e^{-2br} \left[ \sum_{n=0}^N \sum_{k=0}^N a_k a_n r^{n+k-1} \right] r^{D-1} dr \int Y_0^2 d\Omega \quad (106)$$

$$- \frac{D-1}{2} \int_0^\infty e^{-2br} \left[ \sum_{n=0}^N \sum_{k=0}^N a_k a_n r^{n+k-2} n \right] r^{D-1} dr \int Y_0^2 d\Omega \quad (107)$$

$$- B \int_0^\infty e^{-(2b+\mu)r} \left[ \sum_{n=0}^N \sum_{k=0}^N a_k a_n r^{n+k-1} \right] r^{D-1} dr \int Y_0^2 d\Omega. \quad (108)$$

Da die verallgemeinerten Kugelflächenfunktionen normiert sind, gilt  $\int Y_0^2 d\Omega = 1$ . Die restlichen Integrale lassen sich mit Hilfe der Formel  $\int_0^\infty x^n e^{-cx} dx = \frac{n!}{c^{n+1}}$  mit  $c > 0$  und  $n \geq 0$  lösen. Die erste Bedingung ist aufgrund von  $b = \sqrt{-2E} > 0$  für gebundene Zustände erfüllt, während die zweite Bedingung durch eine Einschränkung der Dimension auf  $D \geq 2$  erfüllt werden kann. Mit der Integralformel ergibt sich

$$\langle \psi(b) | H | \psi(b) \rangle = \sum_{n=0}^N \sum_{k=0}^N a_k a_n \left[ -\frac{(n+k+D-1)!}{2^{n+k+D+1}} + \frac{n(n+k+D-2)!}{2^{n+k+D-1}} \right] \quad (109)$$

$$- \frac{n(n-1)(n+k+D-3)!}{2^{n+k+D-1}} + \frac{(D-1)(n+k+D-2)!}{2^{n+k+D}} \quad (110)$$

$$- \frac{n(D-1)(n+k+D-3)!}{2^{n+k+D-1}} \left[ \frac{1}{b^{n+k+D-2}} \right] \quad (111)$$

$$- B \sum_{n=0}^N \sum_{k=0}^N a_k a_n \frac{(n+k+D-2)!}{(2b+\mu)^{n+k+D-1}}. \quad (112)$$

Die Normierung  $\langle \psi(b) | \psi(b) \rangle$  kann analog zur oberen Rechnung berechnet werden

$$\langle \psi(b) | \psi(b) \rangle = \sum_{n=0}^N \sum_{k=0}^N a_k a_n \frac{(n+k+D-1)!}{(2b)^{n+k+D}}. \quad (113)$$

Um die Minima von  $\frac{\langle \psi(b) | H | \psi(b) \rangle}{\langle \psi(b) | \psi(b) \rangle}$  zu erhalten, wird die Ableitung nach  $b$  gebildet und gleich null gesetzt, sodass die Gleichung

$$0 = \left( \frac{d}{db} \langle \psi(b) | H | \psi(b) \rangle \right) \langle \psi(b) | \psi(b) \rangle - \langle \psi(b) | H | \psi(b) \rangle \left( \frac{d}{db} \langle \psi(b) | \psi(b) \rangle \right) \quad (114)$$

gelöst werden muss. Die Ableitungen sind durch

$$\frac{d}{db} (\langle \psi(b) | \psi(b) \rangle) = - \sum_{n=0}^N \sum_{k=0}^N a_k a_n \frac{(n+k+D)!}{2^{n+k+D}} \frac{1}{b^{n+k+D+1}} \quad (115)$$

$$+ 2 \sum_{n=0}^N \sum_{k=0}^N \left( \frac{d}{db} a_k \right) a_n \frac{(n+k+D-1)!}{(2b)^{n+k+D}} \quad (116)$$

sowie

$$\frac{d}{db} (\langle \psi(b) | H | \psi(b) \rangle) = - \sum_{n=0}^N \sum_{k=0}^N A_{n,k,D} a_k a_n \frac{(n+k+D-2)!}{b^{n+k+D-1}} \quad (117)$$

$$+ 2 \sum_{n=0}^N \sum_{k=0}^N A_{n,k,D} \left( \frac{d}{db} a_k \right) a_n A_{n,k,D} \frac{1}{b^{n+k+D-2}} \quad (118)$$

$$+ 2B \sum_{n=0}^N \sum_{k=0}^N a_k a_n \frac{(n+k+D-1)!}{(2b+\mu)^{n+k+D}} \quad (119)$$

mit

$$A_{n,k,D} = - \frac{(n+k+D-1)!}{2^{n+k+D+1}} + \frac{n(n+k+D-2)!}{2^{n+k+D-1}} \quad (120)$$

$$- \frac{n(n-1)(n+k+D-3)!}{2^{n+k+D-1}} + \frac{(D-1)(n+k+D-2)!}{2^{n+k+D}} \quad (121)$$

$$- \frac{n(D-1)(n+k+D-3)!}{2^{n+k+D-1}} \quad (122)$$

und

$$\frac{d}{db} a_{k+1} = \frac{[2b(k+l+\frac{D-1}{2}) - 2B] \left( \frac{d}{db} a_k \right)}{(k+1)(2l+D-1+k)} \quad (123)$$

$$- \frac{2B(\sum_{x=1}^k \left( \frac{d}{db} a_{k-x} \right) (-1)^x \frac{\mu^x}{x!}) + 2(k+l+\frac{D-1}{2}) a_k}{(k+1)(2l+D-1+k)} \quad (124)$$

gegeben. Die Nullstellensuche und die anschließende Berechnung der Energie erfolgt numerisch über das Bisektionsverfahren mit Hilfe eines selbstgeschriebenen Programms. Die mit

dem Programm bestimmten Schranken variieren sehr stark mit der Anzahl  $N$  der Summanden, sodass es für jede Abschirmung eine optimale Anzahl  $N$  an Summanden gibt und damit eine niedrigste Schranke existiert. Sowohl für  $N$  die größer als auch für  $N$  die kleiner als das optimale  $N$  sind, erhält man größere und damit schlechtere Schranken. Deshalb muss man sich meist von unten an das optimale  $N$  herantasten. Dabei gilt, dass die optimale Anzahl an Summanden mit zunehmender Abschirmung  $\mu$  größer wird. Die Berechnung wird numerisch durch die schnell anwachsenden Fakultäten der Form  $(n + k + D - 1)!$  limitiert. Daher ist auch die Anzahl der Summanden und damit die Möglichkeit die Grundzustandsenergie für große  $\mu$  zu berechnen beschränkt.

## Erster angeregter Zustand

Um auch die Dimensionsabhängigkeit des Energieabstands zwischen den Zuständen diskutieren zu können, wird mit dem Variationsverfahren der nächst höhere Energienenwert  $E_1$  abgeschätzt. Dazu wird die zur approximierten Grundzustandswellenfunktion  $\phi_0$  orthogonale Komponente  $\Phi$  der Testfunktion  $\psi$  gebildet. Als Testfunktion wird wieder eine nach  $N$  Summanden abgebrochene Reihenentwicklung der Zustände mit  $l = 0$  und dem Variationsparameter  $b$  genutzt (94).  $\Phi$  ergibt sich dann aus

$$|\Phi\rangle = |\psi\rangle - |\phi_0\rangle\langle\phi_0|\psi\rangle \quad (125)$$

und die obere Schranke für den Energienenwert  $E_1$  ist

$$E_1 \leq \frac{\langle\Phi(b)|H|\Phi(b)\rangle}{\langle\Phi(b)|\Phi(b)\rangle} = \frac{\langle\psi(b)|H|\psi(b)\rangle - E_0|\langle\phi_0|\psi\rangle|^2}{\langle\psi(b)|\psi(b)\rangle - |\langle\phi_0|\psi\rangle|^2}. \quad (126)$$

Damit die Extremstellen bestimmt werden können, wird die Ableitung gebildet und gleich null gesetzt

$$0 = \left[ \frac{d}{db} \langle\psi(b)|H|\psi(b)\rangle - E_0 \frac{d}{db} |\langle\phi_0|\psi\rangle|^2 \right] [\langle\psi(b)|\psi(b)\rangle - |\langle\phi_0|\psi\rangle|^2] \quad (127)$$

$$- [\langle\psi(b)|H|\psi(b)\rangle - E_0|\langle\phi_0|\psi\rangle|^2] \left[ \frac{d}{db} \langle\psi(b)|\psi(b)\rangle - \left( \frac{d}{db} |\langle\phi_0|\psi\rangle|^2 \right) \right]. \quad (128)$$

Da  $\langle\psi(b)|H|\psi(b)\rangle$  und  $\langle\psi(b)|\psi(b)\rangle$  schon im vorherigen Abschnitt berechnet wurden, muss nur noch  $\langle\phi_0|\psi\rangle$  betrachtet werden. Setzt man die approximierte Grundzustandswellenfunktion  $\phi_0$  ein, die nach  $N_0$  Summanden abgebrochen wird und die mit der Energie  $E_0$  berechneten Koeffizienten  $\gamma_n$  besitzt, ergibt sich

$$|\langle\phi_0|\psi\rangle| = \frac{1}{M_0} \int_0^\infty e^{-(b_0+b)r} \left[ \sum_{n=0}^{N_0} \sum_{k=0}^N \gamma_n a_k r^{n+k} \right] r^{D-1} dr \quad (129)$$

$$= \frac{1}{M_0} \sum_{n=0}^{N_0} \sum_{k=0}^N \gamma_n a_k \frac{(n+k+D-1)!}{(b_0+b)^{n+k+D}}, \quad (130)$$

wobei  $M_0$  die Normierung der approximierten Grundzustandswellenfunktion

$$M_0^2 = |\langle\phi_0|\phi_0\rangle| = \sum_{n=0}^{N_0} \sum_{k=0}^{N_0} a_k a_n \frac{(n+k+D-1)!}{(2b_0)^{n+k+D}} \quad (131)$$

ist. Die Ableitung nach  $b$  ergibt sich dann aus

$$\frac{d}{db} (\langle \phi_0 | \psi \rangle)^2 = \frac{2}{M_0} \langle \phi_0 | \psi \rangle \left[ - \sum_{n=0}^{N_0} \sum_{k=0}^N \gamma_n a_k \frac{(n+k+D)!}{(b_0+b)^{n+k+D+1}} \right] \quad (132)$$

$$+ \sum_{n=0}^{N_0} \sum_{k=0}^N \gamma_n \left( \frac{d}{db} a_k \right) \frac{(n+k+D-1)!}{(b_0+b)^{n+k+D}}]. \quad (133)$$

Das Variationsverfahren lieferte in diesem Fall nur Abschätzungen der Grundzustandsenergie. Dies könnte darauf zurückzuführen sein, dass die Anzahl der berechenbaren Summanden  $N$  nicht groß genug ist um einen angeregten Zustand genau genug zu approximieren. Da beim Coulombproblem die höheren Zustände wegen den zugeordneten Laguerre-Polynomen Summanden mit höheren Potenzen enthalten, konvergieren vermutlich auch die Reihenentwicklungen der angeregten Zustände des Yukawa-Potentials langsamer als die des Grundzustands, sodass auch ein größeres  $N$  genutzt werden müsste.

#### 4.4 Bestimmung der Energieeigenwerte aus dem Konvergenzverhalten

Wenn eine Reihenentwicklung  $C(r) \sum_k a_k r^k$  der Zustände vorliegt, können die Energieeigenwerte, wie in [18] und [19] für das Morse-Potential erwähnt, durch die Konvergenz der Reihe bei  $n \rightarrow \infty$  numerisch bestimmt werden. Da die Zustände normierbar sein müssen, muss die Reihe entweder abbrechen, oder die Koeffizienten müssen genügend schnell gegen null laufen. Diese Methode soll im folgenden Abschnitt auch auf das Yukawa-Potential mit (94) angewendet werden.

Dazu werden mit Hilfe der Rekursionsrelation (95) die Koeffizienten  $a_k$  für eine Energie  $E$  berechnet und aufgezeichnet ab welchem  $k^*$  die Koeffizienten mit  $k > k^*$  numerisch nicht mehr von null unterschieden werden können. Aufgrund der Normierbarkeitsbedingung geht  $a_k$  bei einem tatsächlichen Energieeigenwert  $E_x$  schneller gegen null und  $k^*$  ist kleiner als bei einer Energie  $E_x + \Delta$ , die kein Energieeigenwert ist. Variiert man die Energie mit genügend kleiner Schrittweite, kann man so theoretisch alle Energieeigenwerte mit beliebiger Genauigkeit bestimmen.

Hier werden die Eigenwerte mit Hilfe eines selbstgeschriebenen Programms berechnet. Dabei werden Zahlen mit doppelter Maschinengenauigkeit genutzt, sodass Koeffizienten die kleiner sind als ungefähr  $10^{-306}$  nicht mehr von Null unterschieden werden können. Um Energieintervalle zu erhalten, in denen sich ein Energieeigenwert befindet, werden die Koeffizienten vom Programm mit (95) für verschiedene  $b = \sqrt{-2E}$  berechnet. Die Abbildung (4) zeigt exemplarisch für ein Yukawa-Potential mit  $l = 0$ ,  $B = 0.1$  und  $\mu = 0.001$  in 3 Dimensionen die Zahl der Koeffizienten  $k^*$ , nach denen die nachfolgenden Koeffizienten nicht mehr von null unterscheidbar sind, in einem Energiebereich von  $E = -0.005$  bis  $E = -0.0048$  mit einer Abtastrate von  $\Delta_b = 10^{-8}$ . Für die beiden abgetasteten Energien  $E = -0.00490075$  und  $E = -0.00490074$  ist  $k^*$  minimal, somit befindet sich zwischen den beiden Werten ein Minimum für  $k^*$ , dass in diesem Fall den Grundzustand markiert. Der mit Hilfe des Variationsverfahrens gewonnene Wert für den selben Zustand liegt genau innerhalb des hier

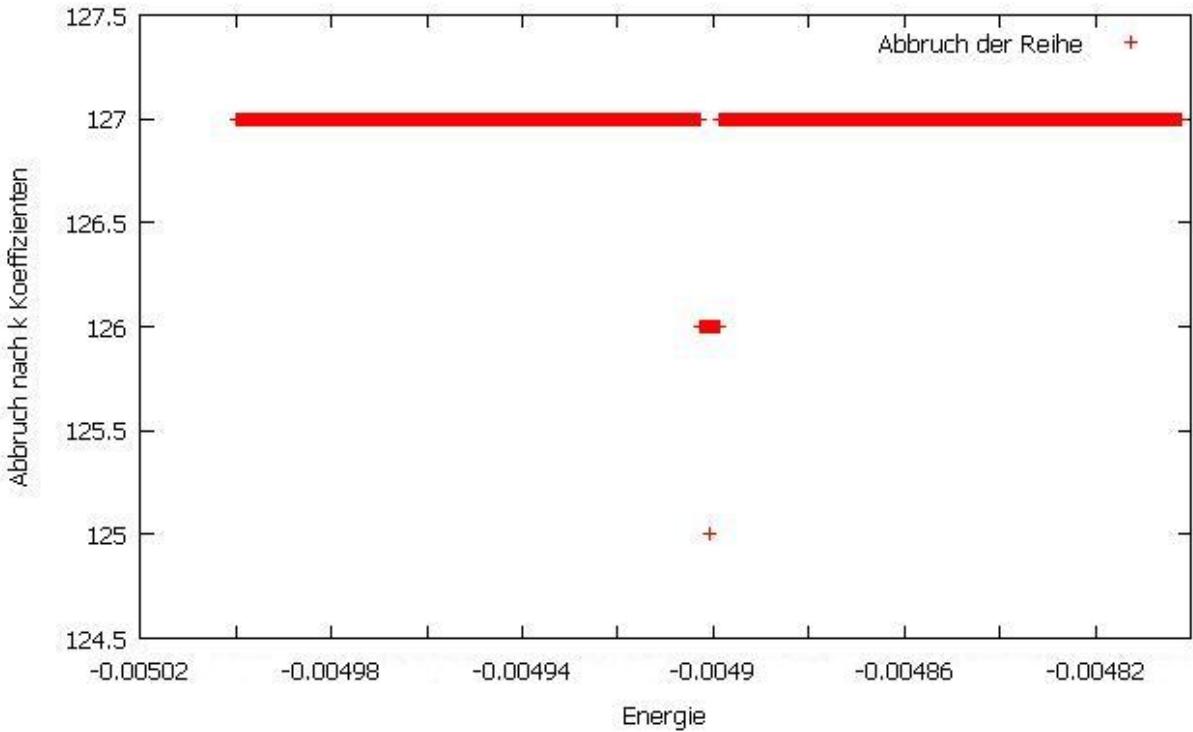


Abbildung 4: Bestimmung der Grundzustandsenergie mit  $B = 0.1$ ,  $D = 3$  und  $\mu = 0.001$

bestimmten Intervalls. Da bei der Abtastung  $l = 0$  vorgegeben wurde, wurde auch die Annahme bestätigt, dass die Grundzustandsenergie die Drehimpulsquantenzahl null besitzt. Für die nachfolgende Bestimmung der Energieeigenwerte wird jeweils der Mittelwert eines gefundenen Intervalls berechnet und als Fehler die halbe Intervallbreite angenommen. Die Zuordnung, ob ein gefundenes Energieintervall zu dem Grundzustand oder zu einem angeregten Zustand gehört, kann bei dieser Methode nur durch Vergleich mit der Energie des entsprechenden Zustands eines ungestörten Coulomb-Potentials erfolgen. Da aber die Quantenzahl  $l$  explizit in die Rekursionsrelation eingeht, kann gezielt nach Energieniveaus mit entsprechendem  $l$  gesucht werden.

Weil die erforderliche Schrittweite  $\Delta_b$ , mit der  $b$  abgetastet wird, um einen Zustand erkennen zu können, in den meisten Fällen  $10^{-8}$  oder kleiner ist und somit eine sehr große Rechenzeit für ein gesamtes Energiespektrum benötigt wird, beschränken wir uns hier auf die Bestimmung des Grundzustandes, des ersten angeregten Zustands mit  $l = 0$  und des ersten angeregten Zustands mit  $l = 1$ . Die Rechenzeit kann weiter verringert werden, wenn man kleine Energieintervalle untersucht, in denen ein Zustand vermutet wird. Für den Grundzustand ist dabei durch das Variationsverfahren eine obere Schranke gegeben. Zusätzlich existiert für alle Zustände mit der Energie des ungestörten Systems eine untere Schranke, da die Energien des Yukawa-Potentials, wie vorher festgestellt, immer geringer sind als die entsprechenden Energien des Coulomb-Potentials mit  $\gamma = B$ .

$\mu$	Störungstheorie	Variationsverfahren	Konvergenz der Reihe
$10^{-6}$	$-1.99999000002 \cdot 10^{-2}$	$-1.59708758308 \cdot 10^{-3}[2]$	$-1.9999906 \cdot 10^{-2} \pm 6 \cdot 10^{-8}$
$10^{-5}$	$-1.99990000252 \cdot 10^{-2}$	$-1.59618787364 \cdot 10^{-3}[2]$	$-1.9999001 \cdot 10^{-2} \pm 6 \cdot 10^{-8}$
$10^{-4}$	$-1.99900025223 \cdot 10^{-2}$	$-1.58721691721 \cdot 10^{-3}[2]$	$-1.9990003 \cdot 10^{-2} \pm 6.2 \cdot 10^{-8}$
$10^{-3}$	$-1.99002516681 \cdot 10^{-2}$	$-1.50006147002 \cdot 10^{-3}[2]$	$-1.9900251 \cdot 10^{-2} \pm 7.4 \cdot 10^{-8}$
$10^{-2}$	$-1.90246157022 \cdot 10^{-2}$	$-8.36742977925 \cdot 10^{-4}[2]$	$-1.9024400 \cdot 10^{-2} \pm 2.4 \cdot 10^{-9}$

Tabelle 1: Grundzustandsenergie mit  $B = 0.1$  und  $D = 2$

$\mu$	Störungstheorie	Variationsverfahren	Konvergenz der Reihe
$10^{-6}$	$-4.99980000151 \cdot 10^{-3}$	$-4.99990000074 \cdot 10^{-3}[1]$	$-4.9999005 \cdot 10^{-3} \pm 1.5 \cdot 10^{-9}$
$10^{-5}$	$-4.99800015116 \cdot 10^{-3}$	$-4.99900007499 \cdot 10^{-3}[3]$	$-4.9990005 \cdot 10^{-3} \pm 1.5 \cdot 10^{-9}$
$10^{-4}$	$-4.98001510759 \cdot 10^{-3}$	$-4.99000749500 \cdot 10^{-3}[3]$	$-4.9900079 \cdot 10^{-3} \pm 2 \cdot 10^{-9}$
$10^{-3}$	$-4.80150175286 \cdot 10^{-3}$	$-4.90074506746 \cdot 10^{-3}[5]$	$-4.9007451 \cdot 10^{-3} \pm 3.2 \cdot 10^{-9}$
$10^{-2}$	$-3.14169326091 \cdot 10^{-3}$	$-4.07058030613 \cdot 10^{-3}[13]$	$-4.0705803 \cdot 10^{-3} \pm 1.4 \cdot 10^{-10}$

Tabelle 2: Grundzustandsenergie mit  $B = 0.1$  und  $D = 3$

## 4.5 Vergleich der Verfahren

In den Tabellen (1),(2), (3) und (4) werden die Energiewerte der verschiedenen Verfahren mit  $B = 0.1$  in verschiedenen Dimensionen und für verschiedene Abschirmungen  $\mu$  miteinander verglichen. Die Zahl in den Klammern hinter dem Energiewert gibt dabei die für das Variationsverfahren benötigte Anzahl an Summanden  $N$  an. Bei der Störungstheorie bezeichnet „/“ entweder eine divergierende oder positive Energieschranke und beim Konvergenzverfahren einen Zustand, der aufgrund zu geringer Genauigkeit nicht gefunden werden konnte.

Es zeigt sich, dass die mit dem Konvergenzverhalten berechneten Werte konsistent mit den zuvor erhaltenen oberen Schranken sind. Die Energieeigenwerte aus dem Variationsverfahren sind entweder größer oder innerhalb der bestimmten Intervalle. Die Störungstheorie liefert für Dimensionen größer als 2 immer größere und damit schlechtere obere Schranken als das Variationsverfahren. Auffällig ist hingegen, dass das Variationsverfahren für  $D = 2$  schlechtere Schranken als die Störungstheorie erster Ordnung liefert. Alle Verfahren sind somit gegenüber der Größe der Abschirmung und der Dimension begrenzt. Beim Variationsverfahren sinkt die Anzahl der berechenbaren Summanden  $N$  aufgrund der Fakultäten mit der Dimension, während die Schranke bei der Störungstheorie mit zunehmender Dimension immer schlechter wird. Bei dem Konvergenzverfahren muss eine wesentlich genauere Abtastung bei großen Dimensionen genutzt werden, weil die Energien mit der Dimension immer

$\mu$	Störungstheorie	Variationsverfahren	Konvergenz der Reihe
$10^{-6}$	$-2.22162223124 \cdot 10^{-3}$	$-2.22212222372 \cdot 10^{-3}[3]$	$-2.2221226 \cdot 10^{-3} \pm 6.7 \cdot 10^{-10}$
$10^{-5}$	$-2.21622312389 \cdot 10^{-3}$	$-2.22122237220 \cdot 10^{-3}[3]$	$-2.2212225 \cdot 10^{-3} \pm 6.7 \cdot 10^{-10}$
$10^{-4}$	$-2.16231228856 \cdot 10^{-3}$	$-2.21223720352 \cdot 10^{-3}[5]$	$-2.2122376 \cdot 10^{-3} \pm 6.7 \cdot 10^{-9}$
$10^{-3}$	$-1.63112862951 \cdot 10^{-3}$	$-2.12370398079 \cdot 10^{-3}[7]$	$-2.1237045 \cdot 10^{-3} \pm 2.6 \cdot 10^{-9}$
$10^{-2}$	/	$-1.35720439133 \cdot 10^{-3}[13]$	/

Tabelle 3: Grundzustandsenergie mit  $B = 0.1$  und  $D = 4$

$\mu$	Störungstheorie	Variationsverfahren	Konvergenz der Reihe
$10^{-6}$	$-1.24760006001 \cdot 10^{-3}$	$-1.24990000249 \cdot 10^{-3}[1]$	$-1.24990024 \cdot 10^{-3} \pm 1.5 \cdot 10^{-9}$
$10^{-5}$	$-1.22600600049 \cdot 10^{-3}$	$-1.24900024995 \cdot 10^{-3}[3]$	$-1.24900046 \cdot 10^{-3} \pm 2 \cdot 10^{-9}$
$10^{-4}$	$-1.01059897125 \cdot 10^{-3}$	$-1.24002495023 \cdot 10^{-3}[5]$	$-1.24002524 \cdot 10^{-3} \pm 2.5 \cdot 10^{-9}$
$10^{-3}$	/	$-1.15245224090 \cdot 10^{-3}[9]$	$-1.1524524 \cdot 10^{-3} \pm 2.7 \cdot 10^{-8}$

Tabelle 4: Grundzustandsenergie mit  $B = 0.1$  und  $D = 5$

$\mu$	Formel	Konvergenz der Reihe
$10^{-6}$	$-4.999899 \cdot 10^{-3} \pm 5 \cdot 10^{-5}$	$-4.9999005 \cdot 10^{-3} \pm 1.5 \cdot 10^{-9}$
$10^{-5}$	$-4.998998 \cdot 10^{-3} \pm 5 \cdot 10^{-5}$	$-4.9990005 \cdot 10^{-3} \pm 1.5 \cdot 10^{-9}$
$10^{-4}$	$-4.989991 \cdot 10^{-3} \pm 5 \cdot 10^{-5}$	$-4.9900079 \cdot 10^{-3} \pm 2 \cdot 10^{-9}$
$10^{-3}$	$-4.900560 \cdot 10^{-3} \pm 5 \cdot 10^{-5}$	$-4.9007451 \cdot 10^{-3} \pm 3.2 \cdot 10^{-9}$
$10^{-2}$	$-4.068054 \cdot 10^{-3} \pm 4.1 \cdot 10^{-5}$	$-4.0705803 \cdot 10^{-3} \pm 1.4 \cdot 10^{-10}$

Tabelle 5: Vugleich der Grundzustandsenergie mit  $B = 0.1$  und  $D = 3$

kleiner werden.

Für die Berechnung der Energiewerte wird die Störungstheorie im folgendem Abschnitt nicht verwendet, da man mit ihr vor allem für größere Störungen schlechtere Schranken erhält, die mit zunehmender Dimension noch schlechter werden, wobei möglichst große Störungen für die Dimensionsabhängigkeit berücksichtigt werden sollten. Gegen das Variationsverfahren spricht, dass die Rechenzeit bei der Bestimmung der Energien meist größer ist, die Energieschranken für  $D = 2$  nur eine schlechte Abschätzung liefern, keine Fehler angegeben werden und keine höheren Zustände berechnet werden können. Deshalb wird das Verhalten des Yukawa-Potentials in beliebigen Dimensionen mit Hilfe der aus dem Konvergenzverhalten bestimmten Werten diskutiert. Die erhaltenen Energieeigenwerte für den 3 dimensionalen Fall können noch mit Hilfe der in [20] und [21] angegebenen numerisch ermittelten Formel

$$E_{n,l} = \frac{-\mu B}{4N_{n,l}^2} \left( \frac{2B}{\mu} - g_{n,l} \right) \frac{\frac{2B}{\mu} - 2A(N_{n,l} + \sigma)^2 + 2CN_{n,l}^2}{\frac{2B}{\mu} - g_{n,l} + 2CN_{n,l}^2} \quad (134)$$

überprüft werden, wobei  $A = 1.9875$ ,  $C = 1.2464$  und  $\sigma = 0.003951$  sind. Der Parameter  $g_{n,l}$  berechnet sich genähert aus [21]

$$g_{n,l} = (1.248n + 1.652l + 1.296)^2. \quad (135)$$

$N_{n,l} = n + l + 1$  entspricht der Definition der Hauptquantenzahl des Coulomb-Potentials. Die Formel gibt die Energien für einen großen Bereich der Quantenzahlen  $n$  und  $l$  mit 1%iger Genauigkeit an. Tabelle (5) zeigt, dass die ermittelten Werte im Rahmen der angegebenen Fehler auch mit (134) übereinstimmen.

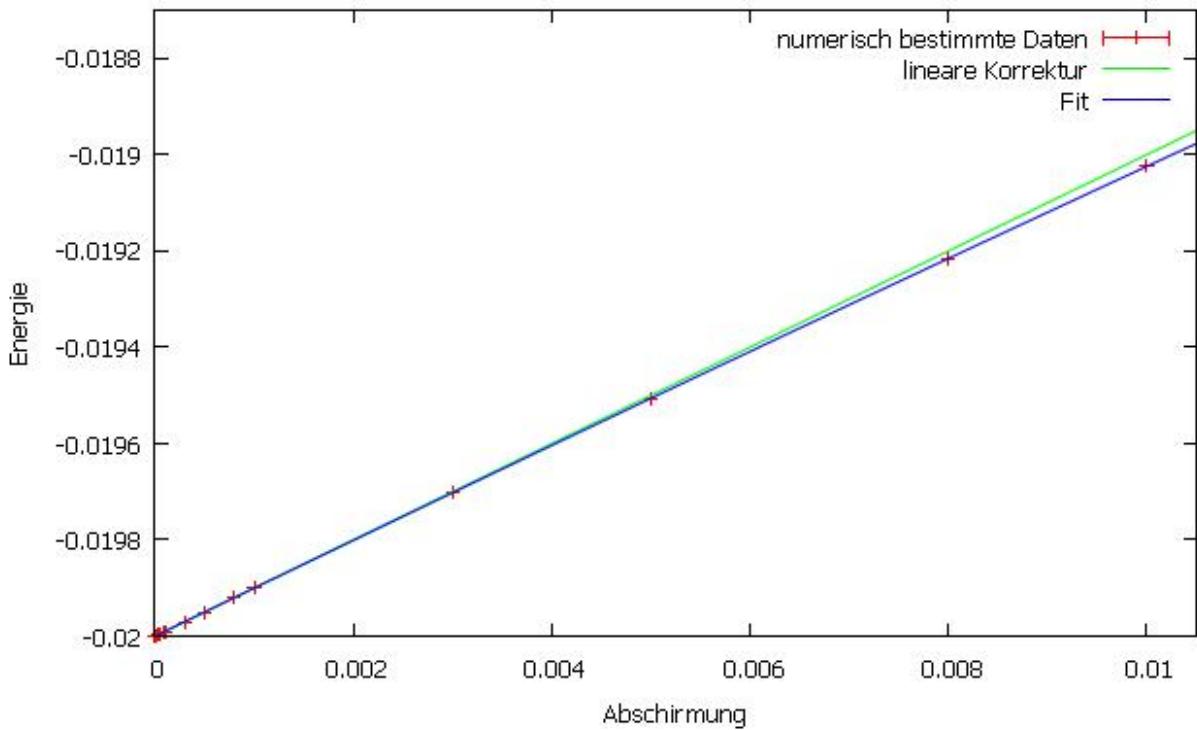


Abbildung 5: Grundzustandsenergie in Abhangigkeit von  $\mu$  fur  $D = 2$  und  $B = 0.1$

## 4.6 Diskussion der Dimensionsabhangigkeit

### Grundzustandsenergie

Zunachst wird die Abhangigkeit der Grundzustandsenergie von der Abschirmung  $\mu$  betrachtet. Dazu wird  $B = 0.1$  gesetzt und  $\mu$  in verschiedenen Dimensionen variiert. Dabei musste bei groeren Abschirmungen und somit kleineren Energien die Abtastrate immer weiter erhoht werden, sodass die benotigte Rechenzeit mit der Groe von  $\mu$  zunimmt. Es konnten abhangig von der jeweiligen Dimension die Energien fur Abschirmungen von bis zu  $\mu = 0.01$  berechnet werden. Mogliche Ursachen dafr sind, dass ab einem bestimmten von der Dimension abhangigen Wert von  $\mu$  keine stabilen Zustande mehr existieren, die numerische Genauigkeit des Programms nicht ausreicht oder eine wesentlich kleinere Abtastung und damit mehr Rechenzeit notig ist. Die genaue Ursache konnte hier nicht ermittelt werden. Die in zwei Dimensionen erhaltenen Werte sind in der Abbildung (5) aufgetragen.

Tragt man zusatzlich die aus der Reihenentwicklung des Yukawa-Potentials folgende lineare Korrektur  $E_0^0 + B\mu$  der Grundzustandsenergie  $E_0^0$  des Coulomb-Potentials auf, zeigt sich, dass die Energieeigenwerte fur kleine Abschirmungen gut durch die lineare Korrektur approximiert werden konnen. Mit zunehmendem  $\mu$  weichen die numerisch bestimmten Daten immer weiter von der linearen Korrektur ab, sodass die Daten durch eine Funktion mit einem zusatzlichem in  $\mu$  quadratischen Term gefittet werden. Die zum fitten genutzte Funktion hat somit die

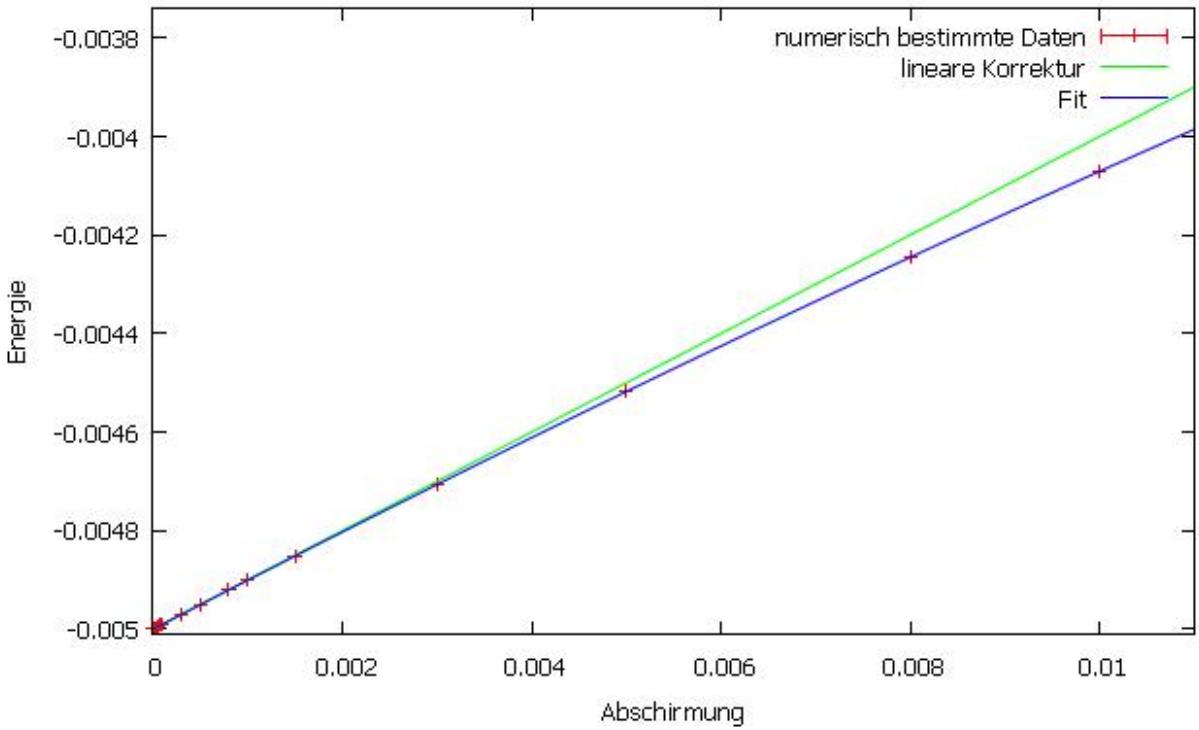


Abbildung 6: Grundzustandsenergie in Abhangigkeit von  $\mu$  fur  $D = 3$  und  $B = 0.1$

Dimension	Parameter $d$
2	$-0.24448 \pm 1.925 \cdot 10^{-4}$
3	$-0.709079 \pm 1.52 \cdot 10^{-3}$
4	$-1.42203 \pm 2.526 \cdot 10^{-2}$
5	$-2.37606 \pm 4.611 \cdot 10^{-3}$
6	$-3.57008 \pm 1.51 \cdot 10^{-2}$

Tabelle 6: Parameter  $d$  fur  $B = 0.1$

Form

$$E_0 = E_0^0 + B\mu + d\mu^2. \quad (136)$$

Fur den Parameter  $d$  erhalt man mit Gnuplot den Wert  $d = -0.24448 \pm 1.925 \cdot 10^{-4}$ . Die Grundzustandsenergie ist somit bei groeren Abschirmungen niedriger als man allein durch die lineare Korrektur erwarten wurde. Mit  $E_0^0 + B\mu$  erhalt man somit im betrachteten Bereich von  $\mu$  eine obere Schranke. Tragt man, wie in den Abbildungen (6) und (7), die Energie in anderen Dimensionen, aber fur den selben Wert von  $B$ , gegen die Abschirmung auf, zeigt sich, dass der Parameter  $d$  abhangig von der Dimension ist. In hoheren Dimensionen wird die Abweichung von der linearen Korrektur immer groer, was aus Tabelle (6) folgt. Die Differenz zwischen den Grundzustandsenergien von Coulomb-Potential und Yukawa-Potential ist bei gleicher Abschirmung in hoheren Dimensionen geringer, betrachtet man aber den Quotienten der Energien von dem gestorten und dem ungestorten System in der gleichen Dimension, nimmt dieser mit zunehmender Dimension ab. Betragt die Grundzustandsenergie mit  $\mu = 0.001$  in zwei Dimensionen noch 99.5% der ungestorten Energie, sind es in 6 Dimensionen

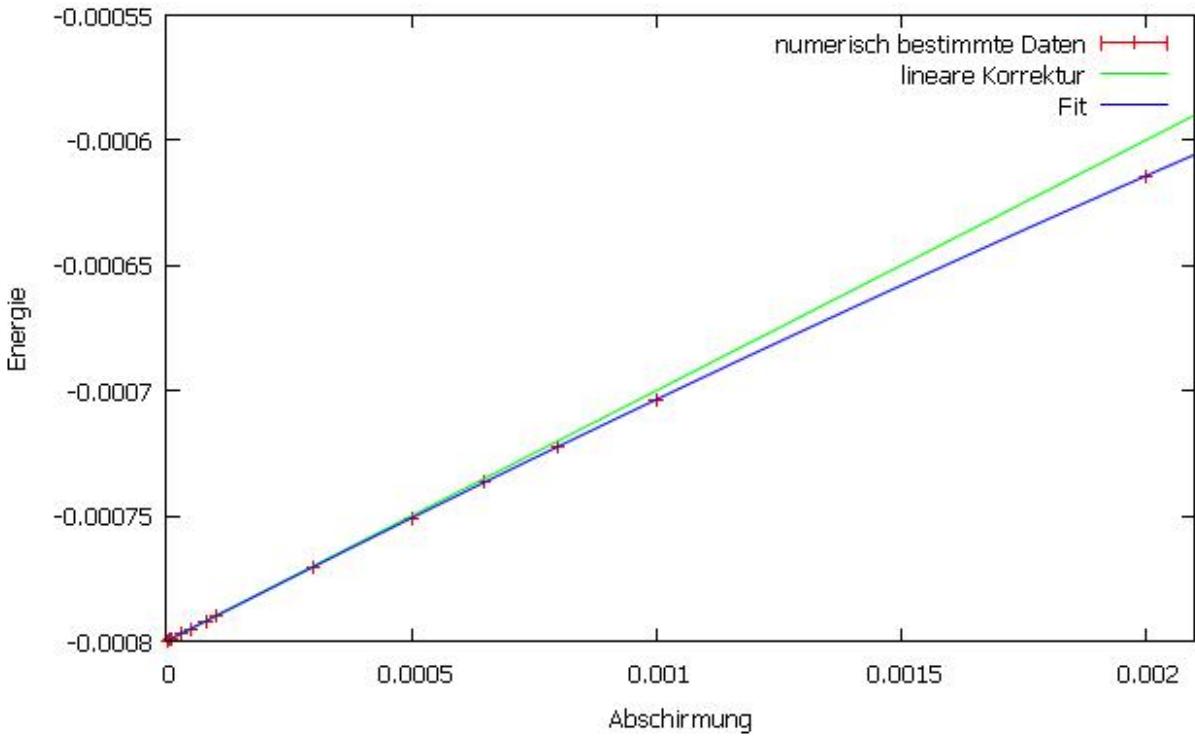


Abbildung 7: Grundzustandsenergie in Abhangigkeit von  $\mu$  fur  $D = 6$  und  $B = 0.1$

$B$	Parameter $d$
0.01	$-0.709043 \pm 1.693 \cdot 10^{-4}$
0.1	$-0.709079 \pm 1.52 \cdot 10^{-3}$
1	$-0.745463 \pm 1.69 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 7: Parameter  $d$  in  $D = 3$  Dimensionen

nur noch 87.9%. Betrachtet man das Verhalten bei anderen Werten fur  $B$ , ist das Verhalten der Grundzustandsenergie sehr ahnlich (Abbildung (8)). Sie kann auch mit (136) gefittet werden, wobei die Werte fur  $d$  von  $B$  abhangig sind.

Aus den Tabellen (7) und (8) folgt, dass  $d$  mit zunehmendem  $B$  kleiner wird. Der Einfluss von  $B$  auf den Parameter  $d$  scheint dabei auch von der Dimension abzuhangen. Um diesen Zusammenhang genauer zu betrachten, sind mehr Daten erforderlich, wobei die benotigte Rechenzeit fur die Grundzustandsenergie sowohl fur kleine als auch fur groe  $B$  zunimmt. Fur groe  $B$  nimmt die Anzahl der numerisch von null unterscheidbaren Koeffizienten zu, wahrend bei kleinen  $B$  die Energie wesentlich genauer abgetastet werden muss.

$B$	Parameter $d$
0.01	$-3.48141 \pm 7.29 \cdot 10^{-3}$
0.1	$-3.57008 \pm 1.51 \cdot 10^{-2}$
1	$-3.67198 \pm 2.949 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 8: Parameter  $d$  in  $D = 6$  Dimensionen

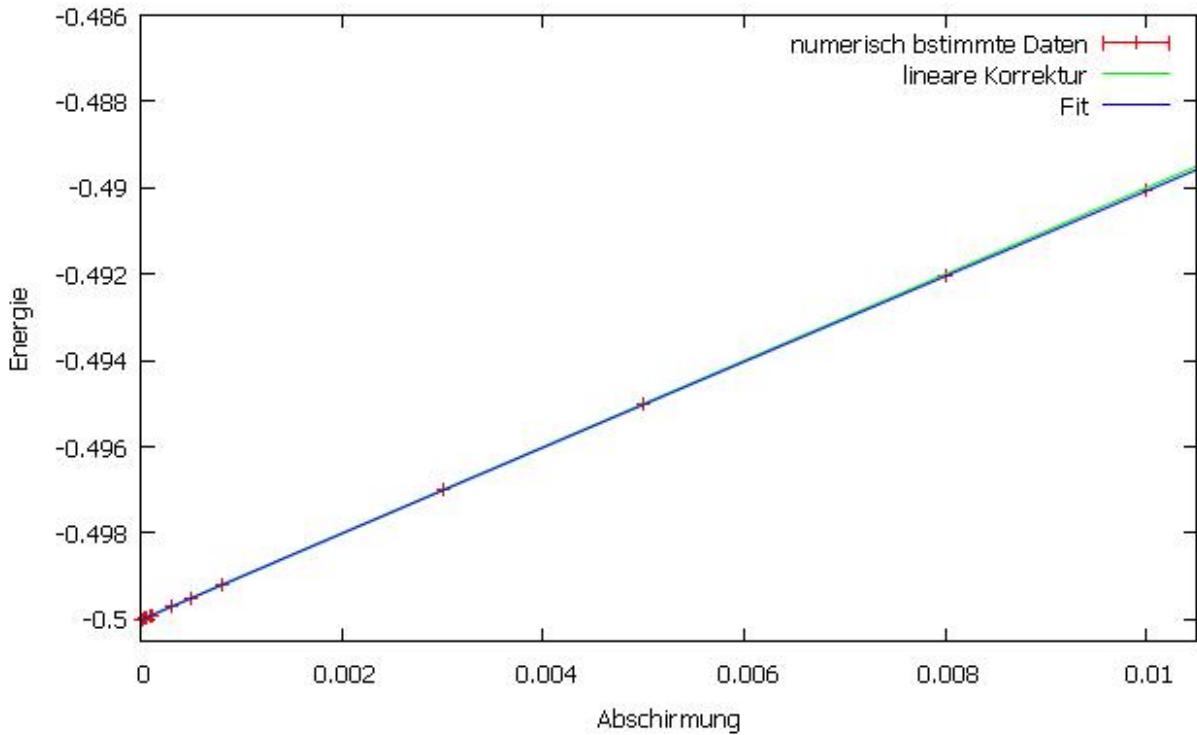


Abbildung 8: Grundzustandsenergie in Abhangigkeit von  $\mu$  fur  $D = 3$  und  $B = 1$

$\mu$	Energie des Zustands $l = 0$	Energie des Zustands $l = 1$
$10^{-6}$	$-1.249900229 \cdot 10^{-3} \pm 2.5 \cdot 10^{-10}$	$-1.249900422 \cdot 10^{-3} \pm 1.5 \cdot 10^{-9}$
$10^{-5}$	$-1.249000179 \cdot 10^{-3} \pm 9.2 \cdot 10^{-8}$	$-1.249000399 \cdot 10^{-3} \pm 1.5 \cdot 10^{-9}$
$10^{-4}$	$-1.240030187 \cdot 10^{-3} \pm 2.5 \cdot 10^{-10}$	$-1.240025207 \cdot 10^{-3} \pm 1.8 \cdot 10^{-9}$
$10^{-3}$	$-1.152932879 \cdot 10^{-3} \pm 1.3 \cdot 10^{-9}$	$-1.152452216 \cdot 10^{-3} \pm 2.7 \cdot 10^{-8}$

Tabelle 9: Vergleich der Energie fur  $l = 0$  und  $l = 1$  mit  $B = 0.1$  und  $D = 3$

Setzt man die berechneten Grundzustandsenergien in die Reihenentwicklung (95) der Wellenfunktion ein, erhalt man eine alternierende Reihe, deren Koeffizienten  $a_k$  mit groer werdendem  $k$  schnell gegen null laufen. Dadurch zeigt sich wieder die ahnlichkeit zum Coulombproblem, da die Laguerre-Polynome (37) auch alternieren. Setzt man hingegen nicht Energiedaten ein, zeigen die Koeffizienten dieses Verhalten nicht.

### Erste angeregte Zustande

In diesem Abschnitt werden die ersten beiden angeregten Zustande mit den Quantenzahlen  $l = 0$  und  $l = 1$  untersucht, da die zufallige  $l$  Entartung vom Wasserstoffatom nicht mehr beim Yukawa-Potential gelten sollte. Es zeigt sich wie fur den dreidimensionalen Fall in Tabelle (9) dargestellt, dass der erste angeregte Zustand mit  $l = 1$  eine niedrigere Energie als der Zustand mit  $l = 0$  besitzt. Dabei sind beide Zustande fur kleine  $\mu$  mit der hier verwendeten Methode energetisch noch nicht unterscheidbar. Die Energiedifferenz zwischen

Dimension	Parameter $d$ bei $l = 0$	Parameter $d$ bei $l = 1$	$\Delta d$
2	$-1.5941 \pm 5.573 \cdot 10^{-3}$	$-1.38403 \pm 3.969 \cdot 10^{-3}$	$0.21 \pm 6.984 \cdot 10^{-3}$
3	$-2.72095 \pm 8.976 \cdot 10^{-3}$	$-2.4775 \pm 1.676 \cdot 10^{-3}$	$0.24345 \pm 9.131 \cdot 10^{-3}$
4	$-4.36447 \pm 5.5116 \cdot 10^{-3}$	$-3.65587 \pm 3.686 \cdot 10^{-3}$	$0.7086 \pm 6.3 \cdot 10^{-3}$
5	$-5.99624 \pm 9.724 \cdot 10^{-3}$	$-5.07323 \pm 6.7 \cdot 10^{-3}$	$0.92301 \pm 1.18 \cdot 10^{-2}$
6	$-7.89371 \pm 1.534 \cdot 10^{-2}$	$-6.6999 \pm 1.129 \cdot 10^{-2}$	$1.19381 \pm 1.9 \cdot 10^{-2}$

Tabelle 10: Parameter  $d$  der angeregten Zustände für  $B = 0.1$

beiden Zuständen nimmt aber mit der Abschirmung zu und wird außerdem mit zunehmender Dimension größer. Vergleicht man die Werte in 3 Dimensionen mit (134), kann man den einzelnen Zuständen zusätzlich zur Quantenzahl  $l$  auch die Quantenzahl  $n$  zuordnen. Für den hier bestimmten Energiebereich der beiden angeregten Zustände kommen nur die beiden Zustände mit  $n = 0$  und  $l = 1$  sowie  $n = 1$  und  $l = 0$  in Frage. Die gefundenen Energieintervalle gehören damit zu den Zuständen  $n = 0, l = 1$  und  $n = 1, l = 0$ . Die ermittelten Werte stimmen dann auch im Rahmen der angegebenen Fehler mit (134) überein. Die Energiewerte der beiden angeregten Zustände weisen dasselbe grundsätzliche Verhalten wie die Grundzustandsenergie auf und werden ähnlich zu (136) mit

$$E_1 = E_1^0 + B\mu + d\mu^2. \quad (137)$$

approximiert, wobei  $E_1^0$  die Energie des ersten angeregten Zustands des Coulomb-Problems ist. Die Energiedifferenz zwischen den beiden Zuständen ist dann durch  $(d_{l=1} - d_{l=0})\mu^2 = \Delta d \cdot \mu^2$  gegeben. In der Tabelle (10) werden die ermittelten Werte von  $d$  für beide Zustände und ihre Differenz angegeben. Der Abstand zwischen den Energien für  $l = 0$  und  $l = 1$  wird mit zunehmender Dimension und mit zunehmender Abschirmung größer. Die in [22] gegebene Beziehung

$$E_{n,l} < E_{n-1,l+1} \quad (138)$$

für die Energieniveaus eines Yukawa-Potentials in 3 Dimensionen scheint somit zumindest für  $E_{1,0}$  und  $E_{0,1}$  auch in beliebigen Dimensionen zu gelten.

Die Energiedifferenz  $\Delta E$  zwischen dem Energieniveau des Grundzustands und der angeregten Zustände ergibt sich bei den hier betrachteten  $\mu$  in guter Näherung nach (137) und (136) durch  $\Delta E = E_1^0 - E_0^0 + (d_2 - d_1)\mu^2$ , wobei  $d_2$  der Fit-Parameter des angeregten Zustandes und  $d_1$  der Fit-Parameter des Grundzustandes ist. Da die angeregten Zustände größere Werte für  $d$  als der jeweilige Grundzustand besitzen und somit für die Dimensionen zwei bis 6 immer  $d_2 < d_1$  gilt, wird der Abstand zwischen den Energien mit zunehmendem  $\mu$  und zunehmender Dimension geringer.

## 5 Zusammenfassung

Anhand des exakt lösbarer Coulombproblems zeigt sich, dass die Energieniveaus und die Wellenfunktionen durch die Anzahl der räumlichen Dimensionen beeinflusst werden. So-wohl die Energie eines gebundenen Zustands als auch der Abstand zwischen den einzelnen

Energieniveaus verändern sich. Das grundsätzliche Verhalten der Energien und auch die Charakterisierung der Niveaus mit Hilfe der Quantenzahl  $n$  bleibt aufgrund der selben Symmetrie in allen Dimensionen erhalten. Die mehrdimensionale Betrachtung ermöglicht auch Verknüpfungen zu anderen quantenmechanischen Modellsystemen herzustellen, wie der Abbildung des Coulombpotentials auf den harmonischen Oszillator.

Für das Yukawa-Potential konnte gezeigt werden, dass sich die Energieeigenwerte für kleine Abschirmungen gut durch ein energetisch verschobenes Coulombpotential approximieren lassen. Die Störung ist in diesem Fall auch in guter Näherung dimensionsunabhängig. Für größere Störungen weichen die Energieeigenwerte mit zunehmender Dimension immer weiter von der dimensionsunabhängigen Korrektur ab. Die Zustände des Yukawa-Potentials konnten außerdem als Reihenentwicklung dargestellt werden.

Um die Energieeigenwerte zu bestimmen wurden drei verschiedene Verfahren genutzt und die Ergebnisse miteinander verglichen. Die Störungstheorie erster und zweiter Ordnung liefert für die Grundzustandsenergie für fast alle betrachteten Dimensionen schlechtere obere Schranken als die beiden anderen Verfahren. Dabei wird die Abweichung von den anderen Verfahren mit zunehmender Abschirmung und Dimension größer. Mit dem Variationsverfahren erhält man für höhere Dimensionen zuverlässig gute obere Schranken für die Grundzustandsenergie, obwohl die Rechenzeit mit zunehmender Abschirmung stark zunimmt. Im zweidimensionalen Fall sind Energiewerte aber wesentlich schlechter als die der Störungstheorie. Eine Abschätzung für den ersten angeregten Zustand war mit dem Variationsverfahren nicht möglich. Mit Hilfe der Betrachtung der Konvergenz der Zustandsreihenentwicklung konnten mit meist geringem Aufwand an Rechenzeit und mit abschätzbarem Fehler die Eigenwerte bestimmt werden. Durch dieses Verfahren konnten auch die ersten angeregten Zustände untersucht werden. Der erste angeregte Zustand mit  $l = 0$  besitzt einen kleineren Energieeigenwert als der Zustand mit  $l = 1$ , wobei die Differenz zwischen den beiden Energien mit der Dimension und der Abschirmung größer wird. Die in 3 Dimensionen herrschende Ordnung der Eigenwerte  $E_{n,l} < E_{n-1,l+1}$  scheint damit auch in höheren Dimensionen zu gelten.

In wie fern die in [20] gegebene numerisch bestimmte Formel für die Energieeigenwerte in drei Dimensionen auch auf beliebige Dimensionen verallgemeinert werden kann, könnte aufgrund der zu geringen Anzahl an Daten nicht beantwortet werden.

## 6 Anhang

### 6.1 Leiteroperatoren

Die Herleitung erfolgt nach [23]. Um die Formel (53) herzuleiten, beginnt man mit den Relationen [13] für die zugeordneten Laguerrepolynome

$$y \frac{d}{dy} L_n^\alpha = n L_n^\alpha(y) - (n + \alpha) L_{n-1}^\alpha(y) \quad (139)$$

und

$$(n + 1)L_n^\alpha(y) - (2n + \alpha + 1 - y)L_n^\alpha(y) + (n + \alpha)L_{n-1}^\alpha(y) = 0. \quad (140)$$

Setzt man (140) in (139) ein erhält man

$$y \frac{d}{dy} L_n^\alpha = (-n - \alpha - 1 + y)L_n^\alpha + (n + 1)L_{n+1}^\alpha(y). \quad (141)$$

Die Relation [13]

$$L_n^{\alpha-1}(y) = L_n^\alpha(y) - L_{n-1}^\alpha(y) \quad (142)$$

eingesetzt in (140) ergibt

$$(n + 1)L_{n+1}^\alpha(y) - (n + \alpha)L_n^\alpha(y) - (n + \alpha)L_n^{\alpha-1}(y) + (\alpha + y - 1)L_n^\alpha(y) = 0. \quad (143)$$

Nutzt man (142) noch einmal, zeigt man, dass die Gleichung

$$(\alpha - 1)L_{n+1}^\alpha(y) + (n + \alpha)[L_n^{\alpha-1}(y) - L_{n+1}^{\alpha-1}(y)] - (\alpha + y - 1)L_n^\alpha(y) = 0 \quad (144)$$

gilt. Wird (142) ein letztes Mal angewendet, gelangt man zu dem Ausdruck

$$(\alpha - 1)L_{n+1}^\alpha(y) - (n + \alpha)L_{n+1}^{\alpha-2}(y) - (\alpha + y - 1)L_n^\alpha(y) = 0, \quad (145)$$

der gemeinsam mit (141) die Formel (53)

$$(n + 1)(n + \alpha)L_{n+1}^{\alpha-2}(y) = [\alpha(\alpha - 1) - y(\alpha + n)]L_n^\alpha(y) + (\alpha - 1)y \frac{d}{dy} L_n^\alpha(y) \quad (146)$$

ergibt.

# Literaturverzeichnis

- [1] Ando, Tsuneya and Fowler, Alan B. and Stern, Frank: Electronic properties of two-dimensional systems, *Rev. Mod. Phys.*, Vol. 54, No. 2, April 1982
- [2] Jonas de Woul, Alexander Merle, Tommy Ohlsson: Establishing analogies between the physics of extra dimensions and carbon nanotubes *Physics Letters B* 714 (2012) 44 – 47
- [3] Sameer M. Ikhdair, Ramazan Sever: A Perturbative Treatment for the Energy Levels of neutral Atoms *International Journal of Modern Physics A* Vol. 21, No. 31 (2006) 6465
- [4] Shi-Hai Dong: *Wave Equations in Higher Dimensions* Springer Dordrecht Heidelberg London New York 2011 S. 15-30
- [5] Nieto, M.M.: Hydrogen atom and relativistic pi-mesic atom in N-space dimensions *Am. J. Phys.* 47, 1067 (1979)
- [6] F. Caruso, J. Martinsb, V. Ogurib: On the existence of hydrogen atoms in higher dimensional Euclidean spaces *Physics Letters A* 377 (2013) 694 – 698
- [7] Shi-Hai Dong: *Wave Equations in Higher Dimensions* Springer Dordrecht Heidelberg London New York 2011 S. 81
- [8] Al-Jaber, S.M.: Quantization of angular momentum in the N-dimensional space. *Nuovo Cimento B* 110, 993-995 (1995)
- [9] Shi-Hai Dong: *Wave Equations in Higher Dimensions* Springer Dordrecht Heidelberg London New York 2011 S. 82-84
- [10] Nieto, M.M., Simmons Jr., L.M.: Eigenstates, coherent states, and uncertainty products for the Morse oscillator. *Phys. Rev. A* 19, 438-444 (1979)
- [11] Shi-Hai Dong: *Wave Equations in Higher Dimensions* Springer Dordrecht Heidelberg London New York 2011 S. 83
- [12] Shi-Hai Dong: *Wave Equations in Higher Dimensions* Springer Dordrecht Heidelberg London New York 2011 S. 84-87
- [13] Gradstein, Ryshik: *Summen- Produkt und Integral-Tafeln*, Band 2, Harri Deutsch, Thun Frankfurt/M. S. 445

- [14] Nouri, S.: Generalized coherent states for the d-dimensional Coulomb problem. *Phys. Rev. A* 60, 1702-1705 (1999)
- [15] Kostelecky, V.A., Nieto, M.M., Truax, D.R.: Supersymmetry and the relationship between the Coulomb and oscillator problems in arbitrary dimensions. *Phys. Rev. D* 32, 2627-2633 (1985)
- [16] Wolfgang Nolting: *Grundkurs TheoretischePhysik 5/2 Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen* 7. aktualisierte Auflage Springer Heidelberg Dordrecht London New York Seite 170ff
- [17] Wolfgang Nolting: *Grundkurs TheoretischePhysik 5/2 Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen* 7. aktualisierte Auflage, Springer Heidelberg Dordrecht London New York Seite 158ff
- [18] Rouse, C.A.: Series solution of the Schrödinger equation with the Morse potential. *Phys. Rev. A* 36, 1-4 (1987)
- [19] Dong, S.H., Sun, G.H.: The series solutions of the non-relativistic equation with the Morse potential. *Phys. Lett. A* 314, 261-266 (2003)
- [20] A. E. S. Green: Energy eigenvalues for Yukawa potentials *Physical Review A* 26, 3 (1982)
- [21] Bernard Silvestre-Brac1, Claude Semay2 and Fabien Buisseret: The auxiliary field method and approximate analytical solutions of the Schrödinger equation with exponential potentials *J. Phys. A: Math. Theor.* 42 (2009) 245301
- [22] Evgeny Z Liverts and Nir Nevo Dinur: About the disposition of energy levels *J. Phys. A: Math. Theor.* 45 (2012) 475301
- [23] Shi-Hai Dong: *Wave Equations in Higher Dimensions* Springer Dordrecht Heidelberg London New York 2011 S. 86