



BACHELORARBEIT
zur Erlangung des akademischen Grades
Bachelor of Science (B.Sc.)
am **Institut für theoretische Physik**

**WKB-Näherung und exakte Lösung des
Pöschl-Teller-Potentials**

WKB approximation and exact solution of the
Pöschl-Teller potential

Münster, den 04.Oktober 2016

AUTOR

Okan Askar

BETREUER UND THEMENSTELLER

Prof. Dr. Gernot Münster

ZWEITGUTACHTER

PD Dr. Jochen Heitger

Diese Fassung der Arbeit unterscheidet sich nur geringfügig von der am 28. September 2016 dem Prüfungsamt vorgelegten Version.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theoretische Grundlagen	3
2.1	Das Pöschl-Teller-Potential	3
2.2	Die Hypergeometrische Differentialgleichung	4
2.2.1	Reguläre Singularitäten einer Differentialgleichung	5
2.2.2	Lösungen der Hypergeometrischen Differentialgleichung	5
2.3	Die WKB-Näherung	7
2.3.1	Herleitung	7
2.3.2	Die Bohr-Sommerfeld'sche-Quantisierungsbedingung	9
2.4	Supersymmetrische Quantenmechanik	15
2.4.1	Grundlagen der Supersymmetrie	15
2.4.2	SUSY-Operatoren und SUSY-Algebra	15
2.4.3	Superpotentiale und die SWKB-Näherung	17
3	Hauptteil	20
3.1	Exakte Lösung des Pöschl-Teller-Potentials	20
3.1.1	Ermittlung der Form der Wellenfunktionen	20
3.1.2	Gebundene Zustände des Pöschl-Teller-Potentials	23
3.2	Die WKB-Näherung des Pöschl-Teller-Potentials	28
3.3	Vergleich der beiden Lösungen	31
3.4	SWKB-Näherung der Pöschl-Teller-Potentials	40
4	Zusammenfassung und Ausblick	44
	Literatur	45

Abbildungsverzeichnis

1	Verlauf des Pöschl-Teller-Potentials für die Wahl der Konstanten zu $A = 50$ sowie $\varrho = 1$	3
2	Verlauf des Pöschl-Teller-Potentials für unterschiedliche Werte von ϱ	4
3	Darstellung des zu untersuchenden aufwärts gerichteten Potentials mit vorgenommener Linearisierung in der Umgebung des klassischen Umkehrpunktes. Die Graphik ist aus [Gri12] übernommen.	10
4	Darstellung der beiden Airy-Funktionen $\text{Ai}(x)$ und $\text{Bi}(x)$. Dargestellt sind des Weiteren auch $\pm M(x) = \pm \sqrt{\text{Ai}(x)^2 + \text{Bi}(x)^2}$. Die Graphik ist [Fun16] entnommen.	12
5	Darstellung des zu flickenden Grenzbereichs zwischen den beiden links- und rechtsseitigen Überlappregionen. Die Graphik ist aus [Gri12] übernommen.	13
6	Darstellung des graphischen Verlaufs der reellen Gammafunktion: Die Γ -Funktion verschwindet - wie dargestellt - für kein $x \in \mathbb{R}$, weist jedoch einfache Polstellen für alle nicht-positiven ganzen Zahlen auf.	25
7	Vergleich zwischen dem exakten und dem durch die WKB-Näherung bestimmten Energiespektrum des Pöschl-Teller-Potentials für die Wahl von $A = \frac{25}{4}$. Die obere Grenze für n beträgt hier 1.	33
8	Vergleich zwischen dem exakten und dem durch die WKB-Näherung bestimmten Energiespektrum des Pöschl-Teller-Potentials für die Wahl von $A = 10$. Die obere Grenze für n beträgt hier $n = 2$	34
9	Darstellung der absoluten Abweichung zwischen dem exakten und dem durch die WKB-Näherung bestimmten Energiespektrum des Pöschl-Teller-Potentials für die Wahl von $A = 20$. Die obere Grenze für n beträgt hier $n = 3$	38
10	Darstellung der absoluten Abweichung zwischen dem exakten und dem durch die WKB-Näherung bestimmten Energiespektrum des Pöschl-Teller-Potentials für die Wahl von $A = 28$. Die obere Grenze für n beträgt hier $n = 4$	38
11	Darstellung der absoluten Abweichung zwischen dem exakten und dem durch die WKB-Näherung bestimmten Energiespektrum des Pöschl-Teller-Potentials für die Wahl von $A = 50$. Die obere Grenze für n beträgt hier $n = 6$	39
12	Darstellung der absoluten Abweichung zwischen dem exakten und dem durch die WKB-Näherung bestimmten Energiespektrum des Pöschl-Teller-Potentials für die Wahl von $A = 100$. Die obere Grenze für n beträgt hier $n = 9$	39
13	Expliziter Vergleich zwischen dem exakten und dem durch die WKB-Näherung bestimmten Energiespektrum des Pöschl-Teller-Potentials für die Wahl von $A = 100$	40

Symbolverzeichnis

$\mathbb{Z} = \{\dots; -2; -1; 0; 1; 2; \dots\}$ - Menge aller ganzen Zahlen

$\mathbb{N} = \{0; 1; 2; \dots\}$ - Menge aller nicht-negativen ganzen Zahlen

$\mathbb{N}^+ = \{1; 2; 3; \dots\}$ - Menge aller positiven ganzen Zahlen

\mathbb{C} - Menge aller komplexen Zahlen

\mathbb{R} - Menge aller reellen Zahlen

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$ - Reduziertes Plancksches Wirkungsquantum

1 Einleitung

If quantum mechanics hasn't profoundly shocked you, you haven't understood it yet.

Niels Bohr

Die von Niels Bohr und Werner Heisenberg im Jahre 1927 präsentierte Kopenhagener Interpretation der Quantenmechanik stellte den damals ersten widerspruchsfrei in sich geschlossenen Versuch dar, das mathematische Fundament, aber auch den bis dahin nicht gänzlich verstandenen - bisweilen als sinnwidrig erscheinenden - Charakter von Quantensystemen, philosophisch zu interpretieren. 5 Jahre später - 1932 - war es der US-amerikanische Mathematiker John von Neumann, der in seinem Werk „*Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*“ auf Grundlage der Kopenhagener Deutung den Grundbaustein für eine mathematisch strengere Formulierung der Quantenmechanik und der quantenmechanischen Postulate legte. Eines der zentralen Postulate der Quantentheorie weist hierbei der (im Allgemeinen) komplexen, quadratintegriblen Wellenfunktion $\Psi(\vec{r}, t) \in \mathbb{C}$ eine besondere Bedeutung zu, da der Zustand eines (beliebigen) quantenmechanischen Systems durch sie vollständig beschrieben wird. Ihre zeitliche Entwicklung in einem (äußeren) Potential V ist hierbei (mit dem Hamiltonoperator $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V$ des Systems) durch die (zeitabhängige) Schrödingergleichung

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}, t) = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V \right] \Psi(\vec{r}, t) = i \cdot \hbar \cdot \frac{d}{dt} \Psi(\vec{r}, t) \quad (1.1)$$

gegeben, die sich im Falle eines zeitunabhängigen Potentials $V = V(\vec{r})$ mit einem Separationsansatz für die Wellenfunktion der Form $\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot \Theta(t)$ auf ihre stationäre Form

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \cdot \psi(\vec{r}) \quad (1.2)$$

reduziert. Das hierbei auftretende Energiespektrum $\{E\}$ kann sowohl diskreter als auch kontinuierlicher Natur sein, wobei hierbei erstgenannte „gebundene Zustände“ und letztgenannte „Streuzustände“ repräsentieren. Wird der Betrachtung nun ein eindimensionales Potential $V(x)$ zugrunde gelegt, welches im Unendlichen abklingt, d.h. also $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = 0$, so können gebundene Zustände im Potential über die Bedingung $E < 0$ und Streuzustände über die Bedingung $E > 0$ gefunden werden.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich speziell mit den gebundenen Zuständen des so genannten Pöschl-Teller-Potentials, welches für $A \in \mathbb{R}^+$ und $\varrho \in \mathbb{R}$ durch

$$V(x) = -\frac{A}{\cosh^2\left(\frac{x}{\varrho}\right)} \quad (1.3)$$

gegeben ist und eines der wenigen Potentiale darstellt, für die die stationäre Schrödingergleichung aus Gleichung (1.2) analytisch exakt gelöst werden kann.

Die so genannte „WKB-Näherung“ stellt ein semiklassisches Näherungsverfahren dar, mithilfe dessen näherungsweise Lösungen der eindimensionalen stationären Schrödingergleichung gefunden werden können. Ein grundsätzliches Ziel dieser Arbeit ist es, die gefundenen exakten Energien der gebundenen Zustände mit den sich aus der WKB- und der aus der supersymmetrischen Quantenmechanik abgeleiteten SWKB-Methode ergebenden Näherungslösungen zu vergleichen, um die Güte dieser Näherungsverfahren hinsichtlich ihrer Anwendung auf das Pöschl-Teller-Potential beurteilen zu können.

Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten analytischen Rechnungen für die exakte Lösung von (1.2) für das durch (1.3) gegebene Pöschl-Teller-Potential stützen sich hierbei auf die in [Flü94] und [Nie78] dargelegten Ausführungen. Die theoretische Aufarbeitung der WKB-Näherung findet vor dem Hintergrund der in [Gri12], [Sch98] und [Nap11] aufgeführten Schilderungen statt. Die in Kapitel 2.4 erfolgende Einführung in die Theorie der Supersymmetrie und der Superpotentiale stützt sich weitestgehend auf [Sof97].

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Das Pöschl-Teller-Potential

Das durch die Gleichung (1.3) beschriebene Pöschl-Teller-Potential - benannt nach den beiden Physikern Herta Pöschl und Edward Teller - stellt ein kurzreichweitiges, attraktives Muldenpotential dar, welches insbesondere für die Beschreibung des Potentialverlaufs zweiatomiger Moleküle Verwendung findet. In Abbildung 1 ist ihr graphischer Verlauf für eine Wahl der Konstanten aus Gleichung (1.3) zu $\rho = 1$ sowie $A = 50$ exemplarisch dargestellt.

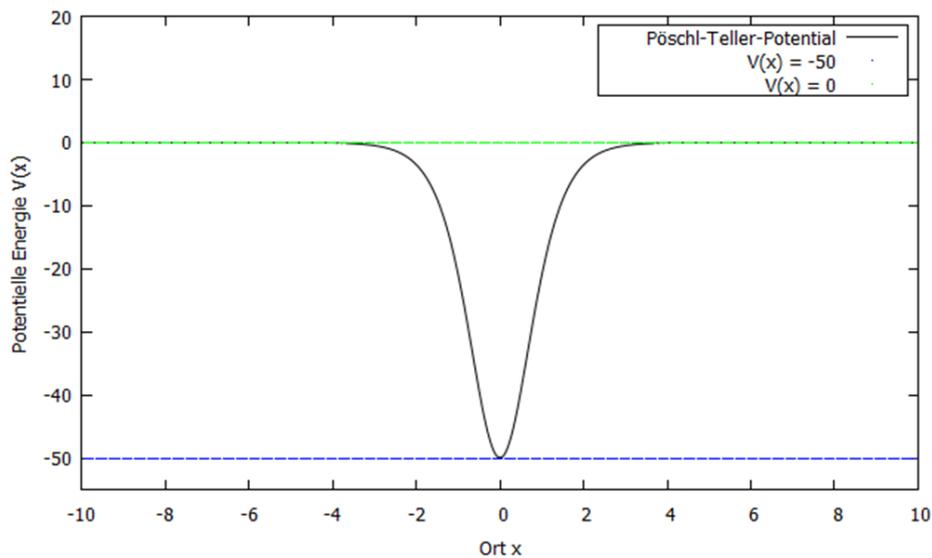


Abbildung 1: Verlauf des Pöschl-Teller-Potentials für die Wahl der Konstanten zu $A = 50$ sowie $\rho = 1$

Mit der allgemeinen Definition des Cosinus Hyperbolicus

$$\cosh(x) = \frac{1}{2} \cdot (e^x + e^{-x}) \quad (2.1)$$

wird das in Abbildung 1 dargestellte Grenzverhalten des Pöschl-Teller-Potentials ersichtlich. So gilt

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \left(-\frac{A}{\cosh^2\left(\frac{x}{\rho}\right)} \right) = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \left(-\frac{4 \cdot A}{e^{2x} + e^{-2x} + 2} \right) = 0 \quad (2.2)$$

sowie

$$\lim_{x \rightarrow 0} \left(-\frac{A}{\cosh^2\left(\frac{x}{\rho}\right)} \right) = -\frac{A}{\cosh^2(0)} = -A. \quad (2.3)$$

Da nun

$$-\cosh^2\left(\frac{x}{\varrho}\right) = -\frac{1}{4} \cdot \left(e^{\frac{x}{\varrho}} + e^{-\frac{x}{\varrho}}\right)^2 \quad (2.4)$$

an der Stelle $x = 0$ ein (globales) Maximum besitzt, besitzt das Pöschl-Teller-Potential aus Gleichung (1.3) an selbiger Stelle demnach ein (globales) Minimum. Der Parameter A des Pöschl-Teller-Potentials spiegelt folglich die Tiefe der sich an der Stelle $x = 0$ befindlichen Potentialmulde wider, wobei das Potential aufgrund des in Gleichung (2.2) aufgeführten Zusammenhangs im Grenzfall $x \rightarrow \pm \infty$ verschwindet. Der Parameter ϱ charakterisiert hierbei die Reichweite des Potentials: Besonders kleine Werte von ϱ spiegeln entsprechend kurzreichweitige Wechselwirkungen wider, wie nachfolgend in Abbildung 2 dargestellt.

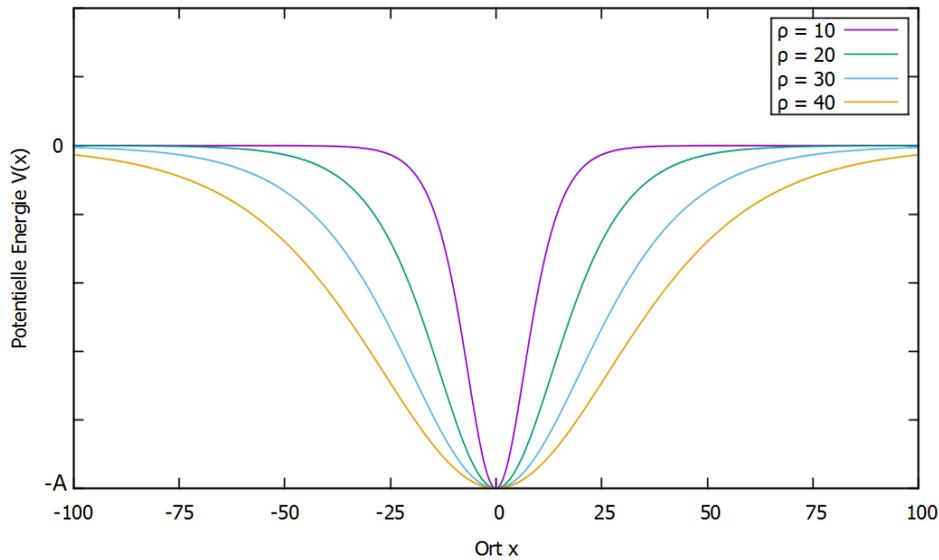


Abbildung 2: Verlauf des Pöschl-Teller-Potentials für unterschiedliche Werte von ϱ

2.2 Die Hypergeometrische Differentialgleichung

Üblicherweise erfordert es die Natur der (eindimensionalen) stationären Schrödingergleichung, sie - auf dem analytischen Wege zur exakten Lösung für ein gegebenes äußeres Potential V - durch geeignete Substitutionen in eine Differentialgleichung bekannter Form (und insbesondere auch bekannter Lösung) zu überführen. Im Rahmen dieser Arbeit wird hierbei für die exakte Lösung der Schrödingergleichung die so genannte hypergeometrische Differentialgleichung von besonderer Bedeutung sein. Sie soll daher im Zuge dieses Kapitels - mit Blick auf die in [Ball16], [D⁺28], [vD15] und [Jür88] getätigten Ausführungen - mathematisch näher beleuchtet werden.

2.2.1 Reguläre Singularitäten einer Differentialgleichung

Gegeben sei eine lineare, homogene Differentialgleichung der Form

$$p(y) \cdot \frac{d^2u}{dy^2} + q(y) \cdot \frac{du}{dy} + r(y) \cdot u = 0. \quad (2.5)$$

Eine Stelle y_0 heißt „Singularität“ (manchmal auch singuläre Stelle) der Differentialgleichung (2.5), falls $p(y_0) = 0$ gilt. Dabei stellt y_0 eine so genannte „reguläre Singularität“ dar, falls zusätzlich

$$\begin{aligned} p(y) &= (y - y_0)^2 \cdot p_0(y) \\ q(y) &= (y - y_0) \cdot p_1(y) \\ r(y) &= p_2(y) \end{aligned}$$

gilt - wobei hierbei die einzelnen $p_i(y)$ Funktionen darstellen, die um die jeweilige Singularität y_0 in ihre Taylorreihen entwickelt werden können - und zusätzlich $p_0(y_0) \neq 0$ gilt.

2.2.2 Lösungen der Hypergeometrischen Differentialgleichung

Die durch die drei beliebigen Parameter $a, b, c \in \mathbb{C}$ charakterisierte lineare Differentialgleichung der Form

$$y \cdot (1 - y) \cdot \frac{d^2u}{dy^2} + [c - (a + b + 1) \cdot y] \cdot \frac{du}{dy} - a \cdot b \cdot u = 0 \quad (2.6)$$

heißt „Hypergeometrische Differentialgleichung“. Sie besitzt drei regulär-singuläre Stellen bei $0, 1$ und ∞ .

Es soll an dieser Stelle zunächst die Lösung von (2.6) in der Umgebung der Singularität bei $y = 0$ untersucht werden. Wie in [vD15] bzw. [Bal16] vorgeführt, kann mithilfe eines (qualitativen) Ansatzes der Form $u(y) \cong u_0 \cdot y^\alpha$ - mit $\alpha \in \mathbb{R}$ - die so genannte „charakteristische Gleichung“ der hypergeometrischen Differentialgleichung (2.6)

$$\alpha \cdot (\alpha - 1) + c \cdot \alpha = 0 \Rightarrow \alpha = 0 \vee \alpha = 1 - c \quad (2.7)$$

gefunden werden. Die beiden Lösungen für α liefern hierbei zwei linear unabhängige Lösungen, die gesuchte allgemeine Lösung von $u(y)$ sollte demnach durch eine Linearkombination der beiden Einzellösungen

$$u(y) = A_1 \cdot w(y) + A_2 \cdot y^{1-c} \cdot \bar{w}(y) \quad \text{mit } A_1, A_2 \in \mathbb{C} \quad (2.8)$$

darstellbar sein.¹

Untersucht werden soll hierbei zunächst die Form von $w(y)$. Mithilfe eines Potenzreihenansatzes $w(y) = \sum_{n=0}^{\infty} w_n \cdot y^n$ - sowie der die Allgemeinheit nicht beschränkenden Annahme, dass $w(y=0) = 1$ - kann aus (2.6) die Rekursionsgleichung

$$w_n = \frac{(a + n - 1) \cdot (b + n - 1)}{n \cdot (c + n - 1)} \cdot w_{n-1} = \dots = \frac{(a)_n \cdot (b)_n}{(c)_n \cdot n!} \cdot w_0 = \frac{(a)_n \cdot (b)_n}{(c)_n \cdot n!} \quad (2.9)$$

¹Es sei hierbei insbesondere auf die explizite y -Abhängigkeit von $w(y)$ bzw. $\bar{w}(y)$ verwiesen.

abgeleitet werden. Hierbei stellen die einzelnen $(i)_n$ so genannte „steigende Pochhammer-Symbole“ dar:

$$(i)_n = \begin{cases} 1 & , \text{ falls } n = 0 \\ i \cdot (i+1) \cdot \dots \cdot (i+n-1) & , \text{ falls } n > 0 \end{cases} \quad (2.10)$$

bzw. unter Nutzung der Γ -Funktion:

$$(i)_n = \begin{cases} 1 & , \text{ falls } n = 0 \\ \frac{\Gamma(i+n)}{\Gamma(i)} & , \text{ falls } n > 0 \end{cases} \quad (2.11)$$

mit

$$\Gamma(n+1) = n! \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (2.12)$$

Damit ist mit der in (2.9) dargestellten Beziehung die Funktion $w(y)$ durch

$$w(y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n \cdot (b)_n}{n! \cdot (c)_n} \cdot y^n \equiv {}_2F_1(a, b; c; y), \quad (2.13)$$

gegeben. Hierbei wurde die so genannte „Gauß'sche) Hypergeometrische Funktion“ ${}_2F_1(a, b; c; y)$ eingeführt, die als Verallgemeinerung aus der geometrischen Reihe

$$\sum_{n=0}^{\infty} y^n \stackrel{|y| \leq 1}{=} \frac{1}{1-y} \quad (2.14)$$

hervorgeht. Sie zeigt - wie die geometrische Reihe auch - ein konvergentes Verhalten, falls $|y| < 1$ gilt.

Die zweite zu untersuchende linear unabhängige Lösung $u(y) = y^{1-c} \cdot \bar{w}(y)$ - o.B.d.A. werde auch hier $\bar{w}(y=0) = 1$ angenommen - führt nach Einsetzen in (2.6) ebenfalls auf eine hypergeometrische Differentialgleichung der Form

$$y \cdot (1-y) \cdot \frac{d^2 \bar{w}}{dy^2} + [(2-c) + [a+b+2-2c+1] \cdot y] \cdot \frac{d\bar{w}}{dy} - (a-c+1)(b-c+1) \cdot \bar{w} = 0, \quad (2.15)$$

die - analog zur Lösung von $w(y)$ - durch eine hypergeometrische Funktion der Form

$$\bar{w}(y) = {}_2F_1(1+a-c, 1+b-c; 2-c; y) \quad (2.16)$$

gelöst wird, sodass die allgemeine Lösung von (2.6) in der Umgebung der Singularität $y=0$ durch eine Superposition von (2.13) und (2.16), d.h. also durch

$$u(y) = A_1 \cdot {}_2F_1(a, b; c; y) + A_2 \cdot y^{1-c} \cdot {}_2F_1(1+a-c, 1+b-c; 2-c; y) \quad (2.17)$$

angegeben werden kann²

Ohne Beweis seien hier des Weiteren - mit Verweis auf [Bal16] und [vD15] für die exakte Herleitung - die beiden Lösungen um die Singularitäten bei $y=1$

²Hier wurde angenommen, dass $c \notin \mathbb{Z}$ gilt. Der Fall $c=1$ hätte zur Folge, dass die beiden einzelnen linear unabhängigen Lösungen identisch und damit linear abhängig wären. Die Fälle $(-c) \in \mathbb{N}$ bzw. $c \in \mathbb{N} \setminus \{1\}$ hätten zur Folge, dass $w(y)$ bzw. $y^{1-c} \cdot \bar{w}(y)$ aufgrund des verschwindenden Nenners nicht definiert wären.

$$u(y) = B_1 \cdot {}_2F_1(a, b; 1 + a + b - c; 1 - y) + B_2 \cdot (1 - y)^{c-a-b} \cdot {}_2F_1(c - a, c - b; 1 + c - a - b; 1 - y) \quad (2.18)$$

- mit den Konstanten $B_1, B_2 \in \mathbb{C}$ sowie $c - a - b \notin \mathbb{Z}$ - und für $y = \infty$

$$u(y) = C_1 \cdot y^{-a} \cdot {}_2F_1\left(a, 1 + a - c; 1 + a - b; \frac{1}{y}\right) + C_2 \cdot y^{-b} \cdot (1 - y)^{c-a-b} \cdot {}_2F_1\left(b, 1 + b - c; 1 + b - a; \frac{1}{y}\right) \quad (2.19)$$

- mit den Konstanten $C_1, C_2 \in \mathbb{C}$ sowie $a - b \notin \mathbb{Z}$ - angegeben.

An dieser Stelle sei bereits darauf hingewiesen, dass die in (2.17) angegebene Beziehung für die weiteren Berechnungen im Hauptteil von entscheidender Bedeutung sein wird.

2.3 Die WKB-Näherung

Die „WKB-Näherung“ (benannt nach den drei Physikern G. Wentzel, A. Kramers und L. Brillouin, welche selbige im Jahre 1926 unabhängig voneinander vorschlugen) stellt ein quasiklassisches Näherungsverfahren dar, mithilfe dessen Näherungslösungen der eindimensionalen stationären Schrödingergleichung gefunden werden können. Sie eignet sich für die Ermittlung von Tunnelwahrscheinlichkeiten durch Potentialbarrieren, aber auch - was im Rahmen dieser Arbeit von besonderer Bedeutung ist - für die Berechnung von Energien gebundener Zustände in einem bestehenden äußeren Potential.

2.3.1 Herleitung

Die WKB-Methode basiert auf der Idee, dass die Wellenfunktion eines Teilchens der Energie E , welches sich in einem Gebiet mit dem konstanten (eindimensionalen) Potential $V(x) = V$ bewegt, für den Fall, dass $E > V$ gilt, durch eine ebene Welle³ der Form

$$\psi(x) = A \cdot e^{\pm i \cdot k \cdot x} \quad (2.20)$$

beschrieben werden kann, wobei hierbei die Wellenzahl

$$k = \frac{\sqrt{2m \cdot (E - V)}}{\hbar} \quad (2.21)$$

eingeführt wurde. Der Wellenfunktion $\psi(x)$ liegt an dieser Stelle (in einem konstanten Potential) folglich ein oszillatorisches Verhalten mit konstanter Amplitude A und Wellenlänge $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ zugrunde.

Für die WKB-Näherung ist nun die Annahme von Bedeutung, dass auch ein

³Hierbei kennzeichnet das positive Vorzeichen im Exponenten eine rechtsläufige und das negative Vorzeichen eine linksläufige Welle.

nicht-konstantes Potential $V(x)$ als (quasi-) konstant angenommen werden kann, sofern die Skala, auf der sich $V(x)$ signifikant ändert, sehr viel größer ist als die Wellenlänge selbst, das Potential also über viele Wellenlängen λ hinweg praktisch konstant ist. Vor dieser Annahme erscheint es sinnvoll, die oszillatorische Form der Wellenfunktion $\psi(x)$ aus (2.20) auch hier für die Wellenfunktion des sich im Potential bewegendes Teilchens anzusetzen, nun aber mit dem zentralen Unterschied sowohl die Wellenlänge als auch die Amplitude mit einer Ortsabhängigkeit zu versehen, d.h. also

$$\psi(x) = A(x) \cdot e^{i\phi(x)} \quad (2.22)$$

für die Wellenfunktion anzusetzen. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung aus (1.2) kann hierbei mit dem klassischen Impuls

$$p(x) = \sqrt{2m \cdot (E - V(x))} \quad (2.23)$$

eines Teilchens der Energie E und potentieller Energie $V(x)$ wie folgt umgeschrieben⁴ werden:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \cdot \psi. \quad (2.24)$$

Wird nun die in (2.22) angegebene Beziehung in (2.24) eingesetzt, so erhält man an dieser Stelle

$$\frac{d^2A}{dx^2} + 2 \cdot i \cdot \frac{dA}{dx} \cdot \frac{d\phi}{dx} + i \cdot A \cdot \frac{d^2\phi}{dx^2} - A \cdot \left(\frac{d\phi}{dx}\right)^2 = -\frac{p^2}{\hbar^2} \cdot A. \quad (2.25)$$

Ein Vergleich der Real- und Imaginärteile links- und rechtsseitig vom Gleichheitszeichen liefert dann die beiden Bedingungen

$$\frac{d^2A}{dx^2} = A \cdot \left[\left(\frac{d\phi}{dx}\right)^2 - \frac{p^2}{\hbar^2} \right] \quad (2.26)$$

und

$$\frac{d}{dx} \left(A^2 \cdot \frac{d\phi}{dx} \right) = 0. \quad (2.27)$$

Aus Gleichung (2.27) folgt sofort die Bedingung, dass mit der Konstanten $C^2 \in \mathbb{R}$

$$\left(A^2 \cdot \frac{d\phi}{dx} \right) = C^2 \Rightarrow A = \frac{C}{\sqrt{\left(\frac{d\phi}{dx}\right)}} \quad (2.28)$$

gelten muss.

Die Gleichung (2.26) hingegen ist an dieser Stelle nicht allgemein lösbar. Ein Erkenntnisgewinn aus ihr kann jedoch auch hier erfolgen, wenn davon ausgegangen wird, dass aufgrund der geringen Schwankung von A der Term A'' ⁵ im Vergleich zu den übrigen Termen vernachlässigbar klein wird und damit

$$\frac{d\phi}{dx} = \pm \frac{p}{\hbar} \Rightarrow \phi(x) = \pm \frac{1}{\hbar} \cdot \int p(x) \cdot dx \quad (2.29)$$

⁴Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass die Ortsabhängigkeiten der Größen p, A und ϕ nachfolgend nicht mehr explizit ausgeschrieben werden.

⁵Der Ausdruck A'' steht hierbei für die zweite Ableitung von A , wie sie durch (2.27) gegeben ist.

gilt.⁶ Die Wellenfunktion aus (2.22) ergibt sich dann mit (2.28) und (2.29) zu

$$\psi(x) \cong \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cdot e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) \cdot dx}. \quad (2.30)$$

Hierbei sei angemerkt, dass sich die allgemeine Lösung für den bis hierhin beleuchteten klassischen Bereich $E > V(x)$ als Superposition der beiden möglichen Formen der Wellenfunktion aus (2.30) ergibt. Im Allgemeinen gilt hierbei für die Konstante $C \in \mathbb{C}$, da jede aus der Integration hervorgehende Konstante durch C ausgedrückt werden kann.

Von besonderer physikalischer Relevanz ist das gemäß der Bornschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretierte Betragsquadrat von (2.30), welches durch

$$|\psi(x)|^2 \cong \frac{C^2}{p(x)} \quad (2.31)$$

gegeben ist. Es ist hierbei auffällig, dass sich die Wahrscheinlichkeitsdichte invers proportional zum Impuls verhält, sie also besonders klein ist, wenn der Impuls (und damit die Teilchengeschwindigkeit) sehr hoch ist und umgekehrt. Dies ist intuitiv einleuchtend, denn Teilchen hoher Geschwindigkeit in einem bestimmten Raumbereich werden sich im selbigen natürlich nicht sehr lange aufhalten.

Die Betrachtung des nicht-klassischen Bereichs $E < V(x)$ kann analog zum oben dargelegten Vorgehen erfolgen und liefert eine Wellenfunktion der Form

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \cdot e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int |p(x)| \cdot dx}. \quad (2.32)$$

Insbesondere sei an dieser Stelle auf die im Nachfolgenden zu diskutierende Problematik der obigen Näherungsergebnisse aus (2.30) und (2.32) hingewiesen, da beide Wellenfunktionen an den klassischen Umkehrpunkten $E = V(x)$ ein divergentes Verhalten aufweisen.

2.3.2 Die Bohr-Sommerfeld'sche-Quantisierungsbedingung

Sei nun exemplarisch - wie nachfolgend in Abbildung 3 dargestellt - ein aufwärts gerichtetes Potential $V(x)$ gegeben, für das sich ein Teilchen der Energie E - je nach betrachtetem Raumbereich - potentiell sowohl in einem klassisch erlaubten als auch in einem klassischen verbotenen Bereich aufhalten könnte.

Für die WKB-Wellenfunktion ergibt sich dann für den in Abbildung 3 dargestellten Sachverhalt mit den Erkenntnissen aus (2.30) und (2.32)

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{S}{\sqrt{p(x)}} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^0 dx' \cdot p(x')} + \frac{T}{\sqrt{p(x)}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^0 dx' \cdot p(x')} & , \text{ falls } x < 0 \\ \frac{W}{\sqrt{|p(x)|}} \cdot e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^x dx' \cdot |p(x')|}, & , \text{ falls } x > 0 \end{cases} \quad (2.33)$$

⁶Die Grenzen der Integration sollen an dieser Stelle zunächst noch nicht von Bedeutung sein.

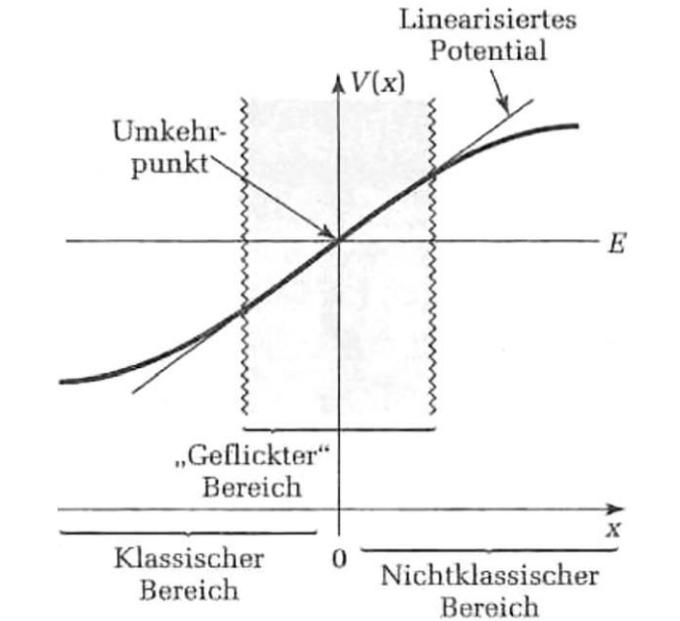


Abbildung 3: Darstellung des zu untersuchenden aufwärts gerichteten Potentials mit vorgenommener Linearisierung in der Umgebung des klassischen Umkehrpunktes. Die Graphik ist aus [Gri12] übernommen.

wobei hierbei aus Gründen der Normierbarkeit die Exponentialfunktion mit dem positiven Exponenten im Raumbereich $x > 0$ verschwinden muss und die Konstanten $S, T, W \in \mathbb{C}$ eingeführt wurden. Die oben bereits angesprochene Problematik der Divergenz der WKB-Wellenfunktion an der Stelle $x = 0$ - dem Übergangsbereich zwischen dem klassisch erlaubten und klassisch verbotenen Bereich - erfordert es nun, die beiden Anteile der WKB-Wellenfunktion aus (2.33) durch die Einführung einer so genannten „Flickwellenfunktion“ ψ_F im kritischen Grenzbereich an selbige anzupassen. Hierbei scheint es sinnvoll, als Flickwellenfunktion die exakte Lösung der Schrödingergleichung im grau unterlegten Bereich in Abbildung 3 anzusetzen.

Da an dieser Stelle jedoch lediglich die Übergangsstelle zwischen dem klassisch erlaubten und dem klassisch verbotenen Bereich Probleme bereitet, soll es hier genügen, eine Linearisierung des Potentials um den klassischen Umkehrpunkt bei $x = 0$, d.h. also

$$V(x) \cong E + \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x=0} \cdot x = E + V'(x=0) \cdot x, \quad (2.34)$$

zu betrachten. Wird dieser linearisierte Ausdruck des Potentials nun in die stationäre Schrödingergleichung aus (1.2) eingesetzt, so nimmt sie folgende Gestalt an

$$\frac{d^2 \psi_F}{dx^2} = \frac{2m \cdot V'(0)}{\hbar^2} \cdot x \cdot \psi_F \quad (2.35)$$

bzw.

$$\frac{d^2\psi_F}{dx^2} = \gamma^3 \cdot x \cdot \psi_F \quad (2.36)$$

unter Einführung der Konstanten

$$\gamma = \left(\frac{2m \cdot V'(0)}{\hbar^2} \right)^{1/3}. \quad (2.37)$$

Durch eine Umskalierung der Form

$$z = \gamma \cdot x$$

kann die Gleichung (2.36) in

$$\frac{d^2\psi_F}{dz^2} = z \cdot \psi_F \quad (2.38)$$

überführt werden. Die durch (2.38) gegebene Differentialgleichung ist zuweilen auch als „Airysche Differentialgleichung“ bekannt. Ihre Lösung ist durch die Superposition der beiden so genannten „Airy-Funktionen“ $\text{Ai}(\gamma \cdot x)$ und $\text{Bi}(\gamma \cdot x)$, d.h. also

$$\psi_F(x) = a \cdot \text{Ai}(\gamma \cdot x) + b \cdot \text{Bi}(\gamma \cdot x) \quad (2.39)$$

mit entsprechenden Konstanten $a, b \in \mathbb{C}$, gegeben. Hierbei sind $\text{Ai}(z)$ und $\text{Bi}(z)$ über die beiden Parameterintegrale

$$\text{Ai}(z) = \frac{1}{\pi} \cdot \int_0^\infty \cos\left(\frac{u^3}{3} + u \cdot z\right) \cdot du \quad (2.40)$$

und

$$\text{Bi}(z) = \frac{1}{\pi} \cdot \int_0^\infty \left[\exp\left(-\frac{u^3}{3} + u \cdot z\right) + \sin\left(\frac{u^3}{3} + u \cdot z\right) \right] \cdot du \quad (2.41)$$

definiert. Die beiden Airy-Funktionen sind in Abbildung 4 dargestellt.

Die in (2.39) angegebene Flickwellenfunktion - die nach obiger Konstruktion eine Näherungslösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung in der Umgebung des klassischen Umkehrpunktes darstellt - muss nun noch an die links- und rechtsseitigen Überlappregionen der WKB-Wellenfunktion aus (2.33) angeschlossen werden. Dies ist nachfolgend graphisch in Abbildung 5 dargestellt.

Für den Anschluss wird von der Grundannahme ausgegangen, dass der Abstand der Überlappregionen zum Umkehrpunkt zum einen so gering ist, dass die Linearisierung des Potentials in dieser Umgebung als gerechtfertigt angenommen werden kann, zum anderen aber so groß ist, dass die aus der WKB-Näherung resultierende Wellenfunktion sinnvoll ist. Insbesondere rechtfertigt diese Betrachtungsweise die Reduktion der Airy-Funktionen auf ihre asymptotischen Formen.

Für den Fall $z = \gamma \cdot x \gg 0$ reduzieren sich die beiden Airy-Funktionen hierbei wie folgt:

$$\text{Ai}(z) \sim \frac{1}{2 \cdot \sqrt{\pi}} \cdot z^{1/4} \cdot \exp\left(-\frac{2}{3} \cdot z^{3/2}\right) \quad (2.42)$$

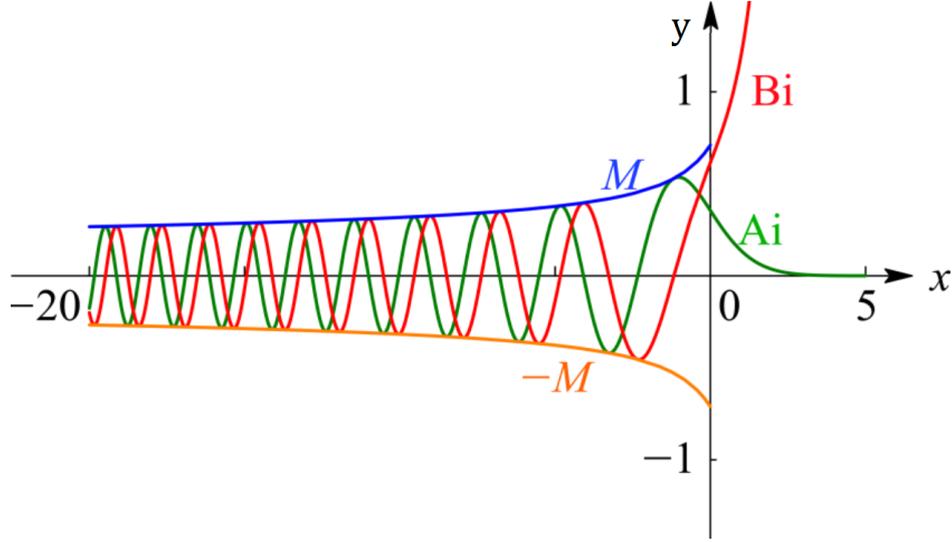


Abbildung 4: Darstellung der beiden Airy-Funktionen $\text{Ai}(x)$ und $\text{Bi}(x)$. Dar- gestellt sind des Weiteren auch $\pm M(x) = \pm \sqrt{\text{Ai}(x)^2 + \text{Bi}(x)^2}$. Die Graphik ist [Fun16] entnommen.

und

$$\text{Bi}(z) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi} \cdot z^{1/4}} \cdot \exp\left(\frac{2}{3} \cdot z^{3/2}\right). \quad (2.43)$$

Für den Fall $z = \gamma \cdot x \ll 0$ gilt hingegen:

$$\text{Ai}(z) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi} \cdot (-z)^{1/4}} \cdot \sin\left(\frac{2}{3} \cdot (-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \quad (2.44)$$

und

$$\text{Bi}(z) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi} \cdot (-z)^{1/4}} \cdot \cos\left(\frac{2}{3} \cdot (-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right). \quad (2.45)$$

Der in (2.23) eingeführte klassische Impuls nimmt in den Überlappregionen (mit der angenommenen Gültigkeit der Linearisierung des Potentials) die folgende Form an

$$p \cong \hbar \cdot \gamma^{3/2} \cdot \sqrt{-x}. \quad (2.46)$$

Betrachtet werde nun zunächst die Überlappregion 2, d.h. also die Region rechtsseitig vom Umkehrpunkt. Das in der WKB-Wellenfunktion in (2.33) benötigte Integral im Argument der Exponentialfunktion kann mithilfe der in (2.46) angegebenen Impulsbeziehung ausgewertet werden. Man erhält somit

$$\int_0^x |p(x')| \cdot dx' \cong \hbar \cdot \gamma^{3/2} \cdot \int_0^x \sqrt{x'} \cdot dx' = \frac{2}{3} \cdot \hbar \cdot (\gamma \cdot x)^{2/3}, \quad (2.47)$$

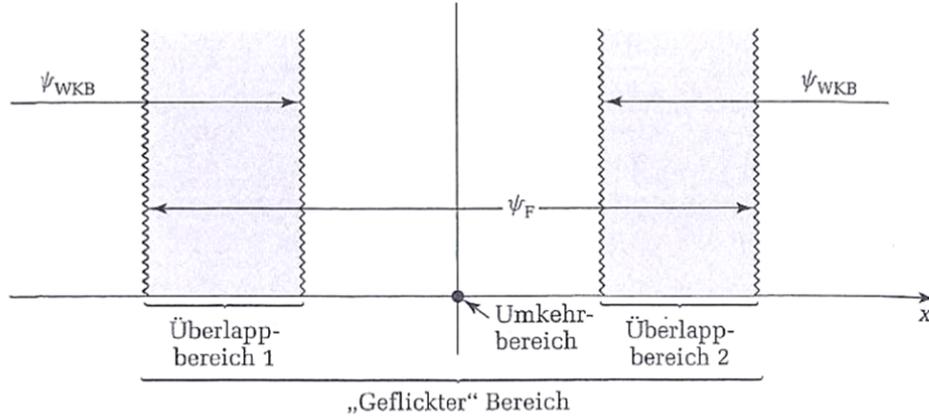


Abbildung 5: Darstellung des zu flickenden Grenzbereichs zwischen den beiden links- und rechtsseitigen Überlappungsregionen. Die Graphik ist aus [Gri12] übernommen.

sodass die WKB-Wellenfunktion in diesem Bereich die folgende Form annimmt:

$$\psi \cong \frac{W}{\sqrt{\hbar} \cdot \gamma^{3/4} \cdot x^{1/4}} \cdot e^{-\frac{2}{3}(\gamma \cdot x)^{3/2}}. \quad (2.48)$$

Die Flickwellenfunktion in der zweiten Überlappungsregion ist - unter Ausnutzung der asymptotischen Form der Airy-Funktionen im Grenzfall $\gamma \cdot x \gg 0$ - gegeben durch

$$\psi_F \cong \frac{a}{2 \cdot \sqrt{\pi} \cdot (\gamma \cdot x)^{1/4}} \cdot e^{-\frac{2}{3}(\gamma \cdot x)^{3/2}} + \frac{b}{\sqrt{\pi} \cdot (\gamma \cdot x)^{1/4}} \cdot e^{\frac{2}{3}(\gamma \cdot x)^{3/2}}. \quad (2.49)$$

Der Vergleich von (2.49) mit (2.48) liefert somit die beiden Bedingungen

$$b = 0 \quad (2.50)$$

und

$$a = 2 \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\gamma \cdot \hbar}} \cdot W. \quad (2.51)$$

Das Verfahren kann in analoger Herangehensweise zum obigen Vorgehen auch für die Überlappungsregion 1 wiederholt werden⁷ und liefert für diese die beiden Bedingungen

$$S = -i \cdot e^{i \cdot \frac{\pi}{4}} \cdot W \quad (2.52)$$

und

$$T = i \cdot e^{-i \cdot \frac{\pi}{4}} \cdot W. \quad (2.53)$$

Die Gleichungen (2.50) - (2.53) heißen „Verbindungsbedingungen“. Mit ihrer Hilfe

⁷Hierbei muss jedoch darauf geachtet werden, dass in der Überlappungsregion 1 die asymptotische Form der Airy-Funktionen für den Fall $z = \gamma \cdot x \ll 0$ genutzt wird

kann die WKB-Wellenfunktion aus (2.33) nun für aufwärts gerichtete Potentiale in folgende Gestalt gebracht werden

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{2W}{\sqrt{|p(x)|}} \cdot \sin \left[\frac{1}{\hbar} \cdot \int_x^{x_2} p(x') \cdot dx' + \frac{\pi}{4} \right] & , \text{ falls } x < x_2 \\ \frac{W}{\sqrt{|p(x)|}} \cdot e^{-\frac{1}{\hbar} \cdot \int_x^{x_2} dx' \cdot |p(x')|} & , \text{ falls } x > x_2 \end{cases} \quad (2.54)$$

wobei an dieser Stelle alle Konstanten durch die Normierungskonstante W ausgedrückt worden sind und der klassische Umkehrpunkt vom Ursprung weg hin zu einer beliebigen Stelle x_2 verschoben wurde.

Für das im Rahmen dieser Arbeit zu untersuchende Pöschl-Teller-Potential ist die Betrachtung eines aufwärts gerichteten Potentials alleine jedoch nicht ausreichend, da die Muldenform des Potentials auch die Diskussion eines abwärts gerichteten Potentials erfordert. Analog zum oben getätigten Vorgehen ergibt sich die WKB-Wellenfunktion für abwärts geneigte Potentiale mit dem Umkehrpunkt an der Stelle x_1 und der Normierungskonstanten W' zu

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{W'}{\sqrt{|p(x)|}} \cdot e^{-\frac{1}{\hbar} \cdot \int_{x_1}^x dx' \cdot |p(x')|} & , \text{ falls } x < x_1 \\ -\frac{2W'}{\sqrt{|p(x)|}} \cdot \sin \left[-\frac{1}{\hbar} \cdot \int_{x_1}^x p(x') \cdot dx' - \frac{\pi}{4} \right] & , \text{ falls } x > x_1 \end{cases} \quad (2.55)$$

In der Region zwischen den beiden Umkehrpunkten, d.h. $x_1 < x < x_2$, müssen die durch (2.54) und (2.55) angegebenen Wellenfunktionen identisch und damit die Argumente der Sinusfunktionen (bis auf Vielfache von π ⁸) übereinstimmen. Mit $\zeta = 1, 2, .. \in \mathbb{N}^+ = \{1; 2; 3; \dots\}$ ergibt sich⁹

$$\frac{1}{\hbar} \cdot \int_x^{x_2} p(x') \cdot dx' + \frac{\pi}{4} = -\frac{1}{\hbar} \cdot \int_{x_1}^x p(x') \cdot dx' - \frac{\pi}{4} + \zeta \cdot \pi \quad (2.56)$$

bzw.

$$\boxed{\int_{x_1}^{x_2} p(x') \cdot dx' = \left(\zeta - \frac{1}{2} \right) \cdot \pi \hbar = \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdot \pi \hbar,} \quad (2.57)$$

unter Einführung von $n = 0, 1, 2, .. \in \mathbb{N} = \{0; 1; 2; \dots\}$.

Die in (2.57) aufgeführte wichtige Beziehung ist in der Literatur hinlänglich als „Bohr-Sommerfeld'sche Quantisierungsbedingung“ bekannt. Dieses Ergebnis ist äußerst weitreichend für die Quantenmechanik, da es erlaubt, genäherte Lösungen der stationären, eindimensionalen Schrödingergleichung (im obigen Fall für Potentialmulden) zu ermitteln, ohne die Schrödingergleichung explizit lösen zu müssen.

⁸Es reicht hier, dass die Argumente der Sinusfunktionen modulo π identisch sind, da jegliche Vorzeichen durch die Normierungsfaktoren ausgedrückt werden können.

⁹Der Fall $\zeta = 0$ wurde hier ausgelassen, da dieser nur einen einzigen Umkehrpunkt zur Folge hätte.

2.4 Supersymmetrische Quantenmechanik

2.4.1 Grundlagen der Supersymmetrie

Mithilfe der in den 1970er Jahren gefundenen Theorie der so genannten Supersymmetrie (SUSY) werden Umwandlungen fermionischer (d.h. Systeme mit halbzahligen Spin) in bosonische Systeme (Systeme mit ganzzahligen Spin) und umgekehrt beschrieben. Formal werden diese Transformationen bewerkstelligt durch den so genannten supersymmetrischen Transformationsoperator Q :

$$Q|\text{Boson}\rangle \propto |\text{Fermion}\rangle \quad \text{bzw.} \quad Q|\text{Fermion}\rangle \propto |\text{Boson}\rangle. \quad (2.58)$$

Hierbei stellt die Energie bei jeder durch Q vermittelten Umwandlung eine Erhaltungsgröße dar.

Die Supersymmetrie geht als Erweiterung aus dem Standardmodell der Teilchenphysik hervor, um konkreten Fragestellungen, die mit Blick auf die Ausführungen des Standardmodells nicht zu beantworten sind (z.B. die Konstituenten der Dunklen Materie, die Gravitation etc.) auf den Grund zu gehen. Da jedem Teilchen des Standardmodells über den Transformationsoperator Q ein supersymmetrisches Partnerteilchen zugeordnet wird, existierten im Rahmen dieser Theorie insgesamt etwas mehr als doppelt so viele Teilchen.

2.4.2 SUSY-Operatoren und SUSY-Algebra

Das einfachste supersymmetrische Modell muss - hier werden Wechselwirkungen noch außer Acht gelassen - insgesamt zwei Teilchensorten enthalten. Hierbei handelt es sich um die Bosonen (B) und die Fermionen (F). An dieser Stelle bezeichnet $n_{B,F}$ die (Besetzungs-) Zahl der Bosonen bzw. Fermionen und $|n_B\rangle$ bzw. $|n_F\rangle$ den zugehörigen korrespondierenden Zustand.¹⁰ Die jeweiligen Besetzungszahlen können für die beiden Teilchensorten durch Erzeuger (b^+ bzw. f^+) bzw. Vernichter (b^- bzw. f^-) erhöht und verringert werden, d.h.

$$b^+|n_B\rangle \propto |n_B + 1\rangle \quad \text{und} \quad b^-|n_B\rangle \propto |n_B - 1\rangle \quad (2.59)$$

bzw.

$$f^+|n_F\rangle \propto |n_F + 1\rangle \quad \text{und} \quad f^-|n_F\rangle \propto |n_F - 1\rangle \quad (2.60)$$

Die durch $N_B = b^+b^-$ bzw. $N_F = f^+f^-$ gegebenen hermiteschen Operatoren bezeichnet man als Teilchenzahloperatoren, da sie die jeweiligen Teilchenzahlen n_B bzw. n_F als zugehörigen Eigenwert besitzen. Da die Fermionen im Gegensatz zu den Bosonen jedoch dem Pauli-Prinzip gehorchen, ist die Fermionen-Besetzungszahl in jedem Fall durch die Bedingung $n_F = 0, 1$ eingeschränkt. Man findet über die Beziehungen

$$f^+|0\rangle = |1\rangle, \quad f^-|1\rangle = |0\rangle \quad \text{und} \quad |2\rangle = (f^+)^2|0\rangle = f^-|0\rangle = 0 \quad (2.61)$$

eine mögliche Darstellung der Fermi-Erzeuger bzw. Vernichter im zweidimensionalen Zustandsraum

¹⁰Es gelten an dieser Stelle $n_B = 0, 1, 2, \dots$ und $n_F = 0, 1$.

$$f^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = (f^-)^\dagger. \quad (2.62)$$

Die einfachsten SUSY-Transformationsoperatoren Q_+ bzw. Q_- aus (2.58) sind bestimmt über die Beziehungen

$$Q_+ |n_B n_F\rangle \propto |n_B - 1, n_F + 1\rangle \quad (2.63)$$

bzw.

$$Q_- |n_B n_F\rangle \propto |n_B + 1, n_F - 1\rangle. \quad (2.64)$$

Die an dieser Stelle aufgeführten Produktzustände

$$|n_B n_F\rangle = |n_B\rangle |n_F\rangle \quad (2.65)$$

spannen den zugehörigen Zustandsraum des hier betrachteten einfachsten SUSY-Modells auf. Für die in (2.63) und (2.64) aufgeführten Transformationsoperatoren scheint es daher an diesem Punkt sinnvoll

$$Q_+ = b^- f^+ \quad (2.66)$$

$$Q_- = b^+ f^- \quad (2.67)$$

anzusetzen. Da die Transformationsoperatoren die Nilpotenz der Fermi-Erzeuger bzw. Vernichter (2.61) erben, findet man mit

$$Q_+^2 = Q_-^2 = 0 \quad (2.68)$$

die für einen supersymmetrischen Hamiltonoperator H_S zu geltende Beziehung

$$[H_S, Q_\pm] = H_S Q_\pm - Q_\pm H_S = 0. \quad (2.69)$$

Dies kann mithilfe eines Ansatzes der Form

$$H_S = \{Q_1, Q_2\} = Q_1 Q_2 + Q_2 Q_1 \quad (2.70)$$

bewerkstelligt werden. Die fehlende Hermitizität der Operatoren Q_\pm kann jedoch auch als Motivation für die Einführung der hermiteschen Operatoren

$$Q_1 = Q_+ + Q_- \quad (2.71)$$

$$Q_2 = -i \cdot (Q_+ - Q_-) \quad (2.72)$$

genutzt werden. In diesem Fall reduziert sich H_S auf

$$H_S = Q_1^2 = Q_2^2 \quad (2.73)$$

und es gelten

$$[H_S, Q_i] = 0 \quad (2.74)$$

und

$$\{Q_i, Q_j\} = 0. \quad (2.75)$$

Die durch (2.74) und (2.75) gegebenen Beziehungen bestehend aus Kommutatoren und Antikommutatoren stehen für die einfachste Form der so genannten Super-Liealgebra bzw. SUSY-Algebra. Sie stellt eine Erweiterung der nicht-assoziativen Liealgebra dar, deren Generatoren hinsichtlich der multiplikativen Verknüpfung zwischen ihnen lediglich den Kommutatorbeziehungen - nicht aber den Antikommutatorbeziehungen - genügen.

2.4.3 Superpotentiale und die SWKB-Näherung

Man kann zeigen (hierfür sei an dieser Stelle z.B. auf [Sof97] verwiesen), dass ein der SUSY-Algebra (also den in (2.74) und (2.75) angegebenen Relationen) genügender supersymmetrischer Hamiltonoperator sich als 2×2 Matrix

$$H_S = \frac{1}{2} \cdot \left[-\frac{\hbar^2}{m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + \bar{W}^2 \right] \cdot \mathbb{1} - \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \cdot \frac{d\bar{W}}{dx} \cdot \frac{\sigma^3}{2} := \begin{pmatrix} H_1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{pmatrix} \quad (2.76)$$

mit

$$\sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.77)$$

schreiben lässt. Hierbei bezeichnet $\bar{W}(x)$ das so genannte „Superpotential“. Es besitzt die Dimension $[\text{Energie}]^{\frac{1}{2}}$ und ist daher nicht als potentielle Energie zu verstehen. Für die beiden Hamiltonoperatoren gilt des Weiteren

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + V_2(x) \quad (2.78)$$

mit

$$V_2 = \frac{1}{2} \cdot \left[\bar{W}^2 \mp \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \cdot \bar{W}' \right]. \quad (2.79)$$

Die beiden Potentiale V_1 und V_2 heißen Partnerpotentiale. Die korrespondierenden Hamiltonoperatoren H_1 und H_2 besitzen, bis auf den Grundzustand, identische nicht-negative Energieeigenwerte - die Energiespektren sind folglich (bis auf den Grundzustand) gleich. Sofern der Grundzustand für H_1 oder H_2 bei $E = 0$ liegt, spricht man von „exakter Supersymmetrie“.¹¹ Existiert jedoch kein Zustand mit $E = 0$ und liegt der Grundzustand (zweifach entartet vorliegend) bei $E > 0$, so spricht man von „gebrochener Supersymmetrie“. Definiert man nun

$$W(x) := \frac{\bar{W}(x)}{\sqrt{2}}, \quad (2.80)$$

so nimmt (2.79) folgende Gestalt an

¹¹Man kann zeigen, dass sofern ein Grundzustand existiert, dieser nicht entartet sein darf. Nachfolgend soll bei vorliegender Exaktheit der Supersymmetrie stets der Operator H_1 den Grundzustand bei $E = 0$ besitzen.

$$V_1 = W^2 \mp \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \cdot W'. \quad (2.81)$$

Aus der in (2.57) angegebenen Bohr-Sommerfeld'schen-Quantisierungsbedingung der WKB-Näherung kann mithilfe der hier dargelegten supersymmetrischen Betrachtungen (insbesondere mithilfe der Gleichungen 2.79) und 2.81)) unter Nutzung des Potentials V_1 auch folgende Relation

$$\int_a^b \sqrt{2m \cdot \left[E_n^{(1)} - W^2 + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W' \right]} \cdot dx = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \hbar \quad (2.82)$$

abgeleitet werden.¹² Entwickelt man nun die im linken Ausdruck stehende Wurzel nach Potenzen von \hbar bis ins lineare Glied, also

$$\sqrt{E_n^{(1)} - W^2 + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'} \cdot dx = \sqrt{E_n^{(1)} - W^2} + \frac{\hbar \cdot W'}{2 \cdot \sqrt{(E_n^{(1)} - W^2) \cdot 2m}} + \dots, \quad (2.83)$$

so erhält man aus (2.82)

$$\begin{aligned} & \int_a^b \sqrt{\left[E_n^{(1)} - W^2 + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W' \right]} \cdot dx \\ &= \int_a^b \sqrt{E_n^{(1)} - W^2} \cdot dx + \frac{\hbar}{2 \cdot \sqrt{2m}} \cdot \int_a^b \frac{W'}{\sqrt{E_n^{(1)} - W^2}} \cdot dx + \dots \\ &= \frac{1}{\sqrt{2m}} \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \hbar = \frac{n\pi\hbar}{\sqrt{2m}} + \frac{\pi \cdot \hbar}{2 \cdot \sqrt{2m}} \end{aligned} \quad (2.84)$$

Die Integralgrenzen a und b kennzeichnen hierbei die beiden klassischen Umkehrpunkte, für die

$$W^2(a) = W^2(b) = E_n^{(1)} \quad (2.85)$$

bzw.

$$-W(a) = W(b) = \sqrt{E_n^{(1)}} \quad (2.86)$$

gilt.¹³

Das Integral

¹²An dieser Stelle meint $E_n^{(1)}$ das dem Hamiltonoperator H_1 zugehörige Energiespektrum.

¹³Diese Folgerung (insbesondere die des Vorzeichens) ist an dieser Stelle außerordentlich nicht-trivial, jedoch im Zuge dieser Herleitung von dringender Nötigkeit. Man kann zeigen (siehe hierfür bspw. [Sof97]), dass die SUSY nur dann exakt wird, wenn das Superpotential im links- bzw. rechtsseitigen Grenzwert $x \rightarrow \pm\infty$ und damit auch bei den beiden Umkehrpunkten einen Vorzeichenwechsel durchführt.

$$\mathcal{J} = \frac{\hbar}{2 \cdot \sqrt{2m}} \cdot \int_a^b \frac{W'}{\sqrt{E_n^{(1)} - W^2}} \cdot dx \quad (2.87)$$

$$= \frac{\hbar}{2 \cdot \sqrt{2m}} \cdot \arcsin \frac{W(x)}{\sqrt{E_n^{(1)}}} \Big|_a^b \quad (2.88)$$

liefert mit der in (2.86) aufgeführten Beziehung

$$\mathcal{J} = \frac{\pi \cdot \hbar}{2 \cdot \sqrt{2m}}, \quad (2.89)$$

sodass sich (2.84) damit schlussendlich wie folgt schreiben lässt

$$\boxed{\int_a^b \sqrt{2m \cdot [E_n^{(1)} - W^2(x)]} \cdot dx = n\pi\hbar.} \quad (2.90)$$

Die in (2.90) aufgeführte Beziehung ist in der Literatur auch als supersymmetrische WKB-Näherung (kurz: SWKB-Näherung) bekannt. Die hier aufgeführte Herleitung (für das Potential V_1) fand an dieser Stelle unter der Prämisse statt, dass die SUSY exakt vorliegend ist. Für das Potential V_2 erhält man analog zum obigen Vorgehen für V_1 (ebenfalls unter Voraussetzung exakt vorliegender Supersymmetrie) entsprechend

$$\int_a^b \sqrt{2m \cdot [E_n^{(2)} - W^2(x)]} \cdot dx = (n+1)\pi\hbar. \quad (2.91)$$

Unter Achtung von (2.90) und (2.91) können nun einige wesentliche Eigenschaften der SWKB-Methode festgehalten werden. Für den Fall $n = 0$ folgt aus (2.90) $a = b$, sodass sich aus (2.86) die Folgerung $E_0^{(1)} = 0$ ergibt. Insbesondere liefert die SWKB-Methode an dieser Stelle im Gegensatz zur WKB-Methode damit - nach Konstruktion - die exakte Grundzustandsenergie. Da die SWKB-Näherung wie auch schon die WKB-Näherung mit steigenden Quantenzahlen n besser werdende Energieeigenwerte liefert, erwartet man für die SWKB-Methode im Gegensatz zur WKB-Methode insgesamt bessere Ergebnisse.

Tatsächlich kann man sogar zeigen, dass die SWKB-Methode für die Klasse der so genannten „forminvarianten Potentiale“ das exakte Energiespektrum reproduziert. Hierbei meint die Forminvarianz zweier Potentiale, dass sich die beiden Partnerpotentiale V_1 und V_2 durch einfache Translation der Form

$$V_1(x; \alpha_1) = V_2(x; \alpha_2) + R(\alpha_1) \quad (2.92)$$

ineinander überführen lassen, wobei die Translation an dieser Stelle durch die Bedingung

$$\alpha_2 = \alpha_1 + c \quad \text{mit } c \in \mathbb{R} \quad (2.93)$$

zusätzlich eingeschränkt ist.

3 Hauptteil

3.1 Exakte Lösung des Pöschl-Teller-Potentials

3.1.1 Ermittlung der Form der Wellenfunktionen

Das Pöschl-Teller-Potential stellt - wie eingangs im Rahmen der Einleitung bereits ausgeführt - eines der wenigen Potentiale dar, für die die eindimensionale stationäre Schrödingergleichung analytisch exakt gelöst werden kann. Hierbei geht aus der in (1.2) gegebenen Schrödingergleichung mit dem eingesetzten Pöschl-Teller-Potential aus (1.3) die folgende zu lösende homogene, lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung hervor:

$$\hat{H}\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} - \frac{A}{\cosh^2\left(\frac{x}{\varrho}\right)} \right] \psi = E\psi. \quad (3.1)$$

Hierbei erweist es sich - wie im weiteren Verlauf der Lösung ersichtlich werden wird - als hilfreich, mit $\lambda < 0$, die folgenden Definitionen einzuführen:

$$\frac{\hbar^2 \cdot \alpha^2}{2m} \cdot \lambda \cdot (\lambda - 1) := A \Rightarrow \lambda = \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{2mA}{\hbar^2 \alpha^2}} \quad (3.2)$$

$$\frac{1}{\alpha} := \varrho \quad (3.3)$$

sowie

$$k^2 := \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (3.4)$$

Unter Achtung der in (3.2) - (3.4) eingeführten Beziehungen geht aus der in (3.1) angegebenen Gleichung damit

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[\alpha^2 \cdot \frac{\lambda \cdot (\lambda - 1)}{\cosh^2(\alpha \cdot x)} + k^2 \right] \cdot \psi = 0 \quad (3.5)$$

als zu lösende Differentialgleichung hervor.

Es bietet sich an dieser Stelle an, eine Substitution der Form

$$y := -\sinh^2(\alpha \cdot x) = 1 - \cosh^2(\alpha \cdot x) \Leftrightarrow \cosh^2(\alpha \cdot x) = 1 - y \quad (3.6)$$

durchzuführen.

Zu beachten ist damit aber auch, dass die Differentiation der Wellenfunktion ψ an die Substitution angepasst werden muss. Zu nutzen ist hierfür die Kettenregel. Für die erste Ableitung von ψ ergibt sich damit

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{dy} \cdot \frac{dy}{dx}. \quad (3.7)$$

Für die zweite Ableitung folgt

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left(\frac{d\psi}{dx} \right) \stackrel{(3.7)}{=} \frac{d}{dx} \left(\frac{d\psi}{dy} \cdot \frac{dy}{dx} \right) = \frac{d^2\psi}{dy^2} \cdot \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 + \frac{d\psi}{dy} \cdot \frac{d^2y}{dx^2}. \quad (3.8)$$

Mit den in (3.7) und (3.8) angegebenen Ableitungen der Wellenfunktion ψ folgt aus der Schrödingergleichung (3.5) unter Nutzung der in (3.6) angegebenen Substitution nun die Beziehung

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} \cdot \left(\frac{dy}{dx}\right)^2 + \frac{d\psi}{dy} \cdot \frac{d^2y}{dx^2} + \left[\alpha^2 \cdot \frac{\lambda \cdot (\lambda - 1)}{1 - y} + k^2\right] \cdot \psi = 0. \quad (3.9)$$

Die nachfolgenden hyperbolischen Identitäten achtend,

$$1 = \cosh^2(x) - \sinh^2(x) \quad (3.10)$$

$$\sinh(x + y) = \sinh(x) \cdot \cosh(y) + \sinh(y) \cdot \cosh(x) \quad (3.11)$$

$$\cosh(x + y) = \cosh(x) \cdot \cosh(y) + \sinh(x) \cdot \sinh(y) \quad (3.12)$$

können die in (3.9) angegebenen Ableitungen von y durch

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dx} &= -\frac{d}{dx} \sinh^2(\alpha \cdot x) \\ &= -2 \cdot \cosh(\alpha \cdot x) \cdot \sinh(\alpha \cdot x) \cdot \alpha \\ &= -\alpha \cdot \sinh(2 \cdot \alpha \cdot x) \end{aligned} \quad (3.13)$$

bzw.

$$\begin{aligned} \frac{d^2y}{dx^2} &= -\frac{d^2}{dx^2} \sinh^2(\alpha \cdot x) \\ &\stackrel{(3.13)}{=} -\frac{d}{dx} [\alpha \cdot \sinh(2 \cdot \alpha \cdot x)] \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$= -2 \cdot \alpha^2 \cdot \cosh(2 \cdot \alpha \cdot x) \quad (3.15)$$

ersetzt werden, sodass - nach Division von α^2 - die folgende Differentialgleichung zu lösen bleibt:

$$\sinh^2(2 \cdot \alpha \cdot x) \cdot \psi'' - 2 \cdot \cosh(2 \cdot \alpha \cdot x) \cdot \psi' + \left[\frac{\lambda \cdot (\lambda - 1)}{1 - y} + \frac{k^2}{\alpha^2}\right] \cdot \psi = 0. \quad (3.16)$$

Nun gilt weiter

$$\begin{aligned} y \cdot (1 - y) &= -\cosh^2(\alpha \cdot x) \cdot \sinh^2(\alpha \cdot x) \\ &\stackrel{(3.11)}{=} -\frac{1}{4} \cdot \sinh^2(2\alpha \cdot x) \end{aligned} \quad (3.17)$$

sowie

$$y - \frac{1}{2} = \sinh^2(\alpha \cdot x) - \frac{1}{2} \quad (3.18)$$

$$\stackrel{(3.10)}{=} \frac{1}{2} - \cosh^2(\alpha \cdot x)$$

$$\stackrel{(3.12)}{=} \frac{1}{2} - [\cosh(2 \cdot \alpha \cdot x) - \sinh^2(\alpha \cdot x)]$$

$$= \frac{1}{2} + \sinh^2(\alpha \cdot x) - \cosh(2 \cdot \alpha \cdot x)$$

$$= -\left(y - \frac{1}{2}\right) - \cosh(2 \cdot \alpha \cdot x) \quad (3.19)$$

und damit schlussendlich

$$y - \frac{1}{2} = -\frac{1}{2} \cdot \cosh(2 \cdot \alpha \cdot x). \quad (3.20)$$

Mithilfe der beiden in (3.17) und (3.20) dargelegten Beziehungen kann (3.16) nun folgendermaßen umgeschrieben werden:

$$y \cdot (1 - y) \cdot \psi''(y) + \left(\frac{1}{2} - y\right) \cdot \psi'(y) - \left[\frac{\lambda \cdot (\lambda - 1)}{4 \cdot (1 - y)} + \frac{k^2}{4\alpha^2}\right] \cdot \psi(y) = 0. \quad (3.21)$$

Unter Einführung des Ansatzes

$$\psi(y) = (1 - y)^{\frac{\lambda}{2}} \cdot v(y) \quad (3.22)$$

geht mit ihren beiden Ableitungen

$$\psi'(y) = (1 - y)^{\frac{\lambda}{2}} \cdot v'(y) - \frac{\lambda}{2} \cdot (1 - y)^{\frac{\lambda}{2}-1} \cdot v(y) \quad (3.23)$$

sowie

$$\psi''(y) = (1 - y)^{\frac{\lambda}{2}} \cdot v''(y) - \lambda \cdot (1 - y)^{\frac{\lambda}{2}-1} \cdot v'(y) + \frac{\lambda}{2} \cdot \left(\frac{\lambda}{2} - 1\right) \cdot (1 - y)^{\frac{\lambda}{2}-2} \cdot v(y) \quad (3.24)$$

die Differentialgleichung

$$y \cdot (1 - y) \cdot v'' + \left[\frac{1}{2} - (1 + \lambda) \cdot y\right] \cdot v' - \frac{1}{4} \cdot \left(\lambda^2 + \frac{k^2}{\alpha^2}\right) \cdot v = 0 \quad (3.25)$$

aus (3.21) hervor.

Durch die Einführung der Abkürzungen

$$a := \frac{1}{2} \cdot \left(\lambda - i \cdot \frac{k}{\alpha}\right) \quad (3.26)$$

und

$$b := \frac{1}{2} \cdot \left(\lambda + i \cdot \frac{k}{\alpha}\right) \quad (3.27)$$

sowie

$$c := \frac{1}{2} \quad (3.28)$$

kann hierbei (3.25) als **hypergeometrische Differentialgleichung**

$$\boxed{y \cdot (1 - y) \cdot v'' + \{c - (a + b + 1) \cdot y\} \cdot v' - a \cdot b \cdot v = 0} \quad (3.29)$$

identifiziert werden. Für sie existiert wegen der in (3.28) angegebenen Beziehung $c = \frac{1}{2} \notin \mathbb{Z}$ eine analytische Lösung.

Da nun aufgrund der in (3.6) eingeführten Definition von y ihr Definitionsbereich in jedem Fall durch $-\infty < y = -\sinh^2(\alpha \cdot x) \leq 0$ eingeschränkt ist, ist an dieser Stelle auch nur die in (2.17) angegebene Lösung der Differentialgleichung um die Singularität an der Stelle $y = 0$ von wesentlicher Bedeutung. Mit der in (3.28) angegebenen Definition von c reduziert sich die allgemeine Lösung von (3.29) damit wie folgt:

$$v(y) = A \cdot {}_2F_1\left(a, b; \frac{1}{2}; y\right) + B \cdot y^{\frac{1}{2}} \cdot {}_2F_1\left(\frac{1}{2} + a, \frac{1}{2} + b; \frac{3}{2}; y\right), \quad (3.30)$$

wobei hierbei für die Konstanten $A, B \in \mathbb{C}$ gilt.

An dieser Stelle bietet es sich an, aus der Gesamtheit der Lösungen, die mit (3.30) kompatibel sind, zwei Standardlösungen $\psi_G(x)$ und $\psi_U(x)$ zu wählen, die ihrerseits gerade bzw. ungerade Funktionen von x darstellen. Mit der Wahl der Konstanten zu $A = 1$ und $B = 0$ folgt aus (3.30) unter Achtung von (3.22) die gerade Standardlösung

$$\psi_G(x) = \cosh^\lambda(\alpha \cdot x) \cdot {}_2F_1\left(a, b; \frac{1}{2}; -\sinh^2(\alpha \cdot x)\right). \quad (3.31)$$

Die ungerade Standardlösung ergibt sich analog zum obigen Vorgehen durch die Wahl der Konstanten zu $A = 0$ und $B = i$ und lautet

$$\psi_U(x) = \cosh^\lambda(\alpha \cdot x) \cdot \sinh(\alpha \cdot x) \cdot {}_2F_1\left(\frac{1}{2} + a, \frac{1}{2} + b; \frac{3}{2}; -\sinh^2(\alpha \cdot x)\right). \quad (3.32)$$

3.1.2 Gebundene Zustände des Pöschl-Teller-Potentials

Für gegebene äußere Potentiale V sind neben der Form der die Schrödingergleichung lösenden Wellenfunktionen ψ auch die Existenz möglicher gebundener Zustände $E < 0$ von besonderem Interesse. Diese sollen nachfolgend für das Pöschl-Teller-Potential näher untersucht werden. Definiert man

$$k = i \cdot \kappa, \quad (3.33)$$

so nimmt der in (3.4) eingeführte Energieterm folgende Gestalt an:

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}. \quad (3.34)$$

Die in (3.26) und (3.27) eingeführten Ausdrücke für a und b werden damit reell und lauten

$$a = \frac{1}{2} \cdot \left(\lambda + \frac{\kappa}{\alpha}\right) \quad (3.35)$$

sowie

$$b = \frac{1}{2} \cdot \left(\lambda - \frac{\kappa}{\alpha}\right). \quad (3.36)$$

Die Suche nach den gebundenen Zuständen erfordert es, das asymptotische Verhalten der beiden in (3.31) und (3.32) angegebenen Standardlösungen im Grenzfall $x \rightarrow -\infty$ zu untersuchen. Die beiden Hyperbelfunktionen reduzieren sich in dieser Betrachtung damit wie folgt:

$$\sinh(\alpha \cdot x) = \frac{1}{2} \cdot (e^{\alpha \cdot x} - e^{-\alpha \cdot x}) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} -\frac{1}{2} \cdot e^{\alpha \cdot |x|} \quad (3.37)$$

bzw.

$$\cosh(\alpha \cdot x) = \frac{1}{2} \cdot (e^{\alpha \cdot x} + e^{-\alpha \cdot x}) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} +\frac{1}{2} \cdot e^{\alpha \cdot |x|}. \quad (3.38)$$

Die hypergeometrische Funktion genügt der Identität

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b; c; z) &= \frac{\Gamma(c) \cdot \Gamma(b-a)}{\Gamma(b) \cdot \Gamma(c-a)} \cdot (-z)^{-a} \cdot {}_2F_1\left(a, a-c+1; a-b+1; \frac{1}{z}\right) \\ &+ \frac{\Gamma(c) \cdot \Gamma(a-b)}{\Gamma(a) \cdot \Gamma(c-b)} \cdot (-z)^{-b} \cdot {}_2F_1\left(b, b-c+1; b-a+1; \frac{1}{z}\right), \end{aligned} \quad (3.39)$$

die in der vorliegenden asymptotischen Betrachtung für $|z| \rightarrow \infty$ mit

$${}_2F_1(a, b; c; 0) = 1 \quad (3.40)$$

die folgende Gestalt annimmt

$${}_2F_1(a, b; c; z) = \frac{\Gamma(c) \cdot \Gamma(b-a)}{\Gamma(b) \cdot \Gamma(c-a)} \cdot (-z)^{-a} + \frac{\Gamma(c) \cdot \Gamma(a-b)}{\Gamma(a) \cdot \Gamma(c-b)} \cdot (-z)^{-b}. \quad (3.41)$$

Die beiden in (3.31) und (3.32) angegebenen Standardlösungen streben im betrachteten Grenzfall - unter Achtung der in (3.37), (3.38) und (3.41) aufgeführten Beziehungen - damit gegen

$$\begin{aligned} \psi_G(x) \rightarrow 2^{-\lambda} \cdot \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \cdot \left[\frac{\Gamma(a-b) \cdot 2^{2b}}{\Gamma(a) \cdot \Gamma\left(\frac{1}{2}-b\right)} \cdot e^{\kappa \cdot |x|} \right. \\ \left. + \frac{\Gamma(b-a) \cdot 2^{2a}}{\Gamma(b) \cdot \Gamma\left(\frac{1}{2}-a\right)} \cdot e^{-\kappa \cdot |x|} \right] \end{aligned} \quad (3.42)$$

sowie

$$\begin{aligned} \psi_U(x) \rightarrow \pm 2^{-(\lambda+1)} \cdot \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \cdot \left[\frac{\Gamma(a-b) \cdot 2^{2b+1}}{\Gamma\left(a+\frac{1}{2}\right) \cdot \Gamma(1-b)} \cdot e^{\kappa \cdot |x|} \right. \\ \left. + \frac{\Gamma(b-a) \cdot 2^{2a+1}}{\Gamma\left(b+\frac{1}{2}\right) \cdot \Gamma(1-a)} \cdot e^{-\kappa \cdot |x|} \right]. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Da die in (3.42) und (3.43) angegebenen Wellenfunktionen aber in jedem Fall normierbar sein müssen und damit für die beiden Integrale

$$\int_{\mathbb{R}} |\psi_{G,U}(x)|^2 \cdot dx = 1 < \infty \quad (3.44)$$

gelten muss, ist es an dieser Stelle zwingend nötig, dass die in (3.42) und (3.43) angegebenen Terme $\propto e^{|\kappa| \cdot x}$ verschwinden. Da die Gammafunktion jedoch keine Nullstellen aufweist, kann das Verschwinden der Terme lediglich durch ein divergentes Verhalten der im Nenner aufgeführten Terme bewerkstelligt werden. In diesem Zusammenhang sei daher nachfolgend in Abbildung 6 der graphische Verlauf der reellen Gammafunktion dargestellt.

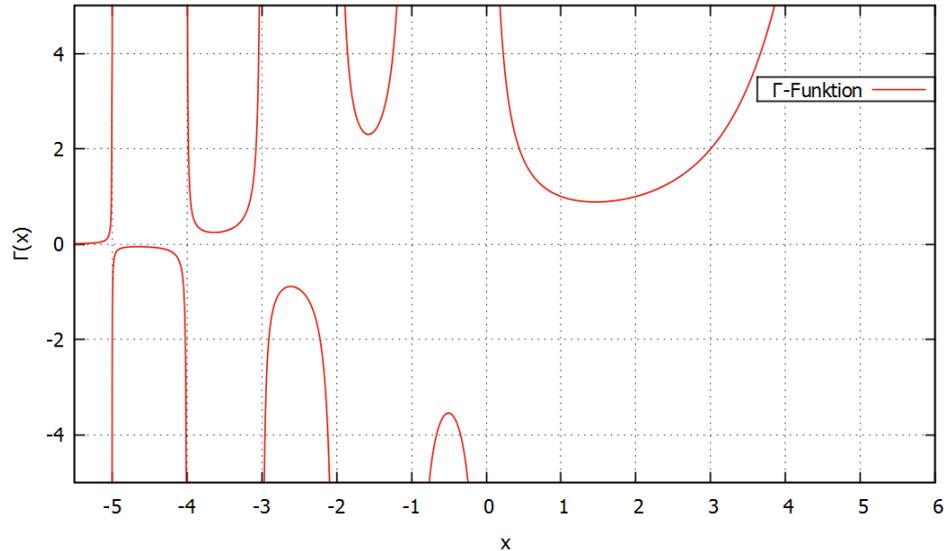


Abbildung 6: Darstellung des graphischen Verlaufs der reellen Gammafunktion: Die Γ -Funktion verschwindet - wie dargestellt - für kein $x \in \mathbb{R}$, weist jedoch einfache Polstellen für alle nicht-positiven ganzen Zahlen auf.

Mithilfe der Weierstraßschen Darstellung der Gammafunktion¹⁴

$$\frac{1}{\Gamma(x)} = x \cdot e^{\gamma \cdot x} \cdot \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{x}{n}\right) \cdot e^{-\frac{x}{n}} \quad (3.45)$$

lassen sich die in Abbildung 6 dargestellten Polstellen der Gammafunktion verstehen. Offensichtlich folgt aus Gleichung (3.45) sofort, dass

$$\frac{1}{\Gamma(x)} = 0 \Leftrightarrow x = 0 \vee x = -n \quad \text{mit } n \in \mathbb{N}. \quad (3.46)$$

Diese Feststellung ist für das weitere Vorgehen von entscheidender Bedeutung, da die in (3.42) und (3.43) angegebenen Terme $\propto e^{|\kappa| \cdot x}$ damit nur dadurch verschwinden können, dass die im Nenner aufgeführten Gammafunktionen Polstellen aufweisen und ihre reellen Argumente nach (3.46) negativ ganzzahlig

¹⁴Hierbei bezeichnet $\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \dots + \frac{1}{n}\right) - \log(n)$ die so genannte Eulersche Konstante.

werden bzw. verschwinden.¹⁵

Für die eigentliche Bestimmung der Energieeigenwerte ist es nun noch von Bedeutung, für die beiden in (3.42) und (3.43) aufgeführten Standardlösungen, die Gammafunktionen zu identifizieren, die tatsächlich Polstellen aufweisen und damit das Verschwinden der Terme $\propto e^{|\kappa|x}$ bewerkstelligen. Da nun - wie in (3.2) definiert - der Parameter λ in jedem Fall negativ vorliegend ist, folgt - unter zusätzlicher Achtung der Tatsache, dass wegen (3.34) κ selbst stets positiv vorliegt -, dass

$$b = \frac{1}{2} \cdot \left(\overset{<0}{\lambda} - \overset{>0}{\frac{\kappa}{\alpha}} \right) \quad (3.47)$$

in jedem Fall negativ ist. Damit sind jedoch die beiden Terme $\frac{1}{2} - b$ für die asymptotische Form der geraden bzw. $1 - b$ für die asymptotische Form der ungeraden Standardlösung aus (3.42) bzw. (3.43) selbst stets positiv. Demnach können nur die beiden jeweils anderen im Nenner verbleibenden Gammafunktionen der beiden Standardlösungen tatsächlich Polstellen aufweisen.

Aus der geraden Standardlösung (3.31) folgt mit der in (3.35) angegebenen Definition von a für gerade Eigenzustände mit der sich aus (3.42) ergebenden Forderung der Ganzzahligkeit von a damit die Beziehung

$$a = \frac{1}{2} \cdot \left(\lambda + \frac{\kappa}{\alpha} \right) = -n \Leftrightarrow \kappa = -\alpha \cdot (2n + \lambda) \quad (3.48)$$

Analog dazu erhält man aus der ungeraden Standardlösung (3.32) für die ungeraden Eigenzustände die Beziehung

$$a + \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \cdot \left(\lambda + \frac{\kappa}{\alpha} \right) + \frac{1}{2} = -n \Leftrightarrow \kappa = -\alpha \cdot (2n + 1 + \lambda). \quad (3.49)$$

Mit dem in (3.34) angegebenen Zusammenhang folgen damit sofort die sich hieraus ergebenden Energieterme, wobei hierbei zusätzlich (3.48) und (3.49) wie folgt zusammengefasst werden können:

$$E_n = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \cdot (\lambda + n)^2 \text{ mit } 0 \leq n < -\lambda \quad (3.50)$$

bzw. unter Achtung der in (3.2) und (3.3) angegebenen Substitutionsvorschriften

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m\varrho^2} \cdot \left[\sqrt{\frac{2mA\varrho^2}{\hbar^2} + \frac{1}{4}} - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2. \quad (3.51)$$

Mithilfe der in (3.2) angegebenen Definition von λ kann die in (3.50) angegebene obere Schranke für n auch folgendermaßen geschrieben werden:

$$0 \leq n < -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{2mA\varrho^2}{\hbar^2}}. \quad (3.52)$$

Hierbei ist an dieser Stelle die wichtige Erkenntnis festzuhalten, dass aus den

¹⁵Da im Rahmen dieser Arbeit $\mathbb{N} = \{0; 1; 2; \dots\}$ insbesondere auch die 0 einschließt, soll nachfolgend mit $n \in \mathbb{N}$ der Fall $n = 0$ implizit eingeschlossen sein.

in (3.50) und (3.52) angegebenen Beziehungen folgt, dass das Pöschl-Teller-Potential nur eine endliche Anzahl von gebundenen Zuständen aufweist, wobei die obere Schranke n_{oben} offensichtlich von den Potentialparametern A und ϱ sowie der Teilchenmasse m abhängt. Hierbei begünstigen besonders große Potentialtiefen A bzw. besonders langreichweitige Wechselwirkungen (stellvertretend repräsentiert durch entsprechend große Werte von ϱ) eine größere Anzahl von gebundenen Zuständen im Potential. Wegen 3.52 ist des Weiteren festzuhalten, dass - völlig unabhängig davon, wie klein die Muldentiefe A gewählt wird - stets mindestens ein gebundener Zustand ($n = 0$) existiert.

Der Vollständigkeit halber seien hier des Weiteren auch die den Zuständen zugehörigen Wellenfunktionen aufgeführt. Wegen der in (3.48) und (3.49) angegebenen Beziehungen reduzieren sich die gerade und die ungerade Standardlösung ihrerseits auf Polynome. Mit

$$b = \frac{1}{2} \cdot \left(\lambda - \frac{\kappa}{\alpha} \right) = -a + \lambda \quad (3.53)$$

und der für die hypergeometrische Funktion für $a = -n$ - mit $n \in \mathbb{N}$ - geltenden Beziehung

$${}_2F_1(a = -n, b; c; z) = \sum_{j=0}^n (-1)^j \cdot \binom{n}{j} \cdot \frac{(b)_j}{(c)_j} \cdot z^j \quad (3.54)$$

nimmt die gerade Standardlösung aus (3.31) damit im Allgemeinen die folgende Form an:

$$\begin{aligned} \psi_n^{(G)}(x) &= \cosh^\lambda(\alpha \cdot x) \cdot {}_2F_1\left(-n, b = n + \lambda; \frac{1}{2}; -\sinh^2(\alpha \cdot x)\right) \\ &= \cosh^\lambda(\alpha \cdot x) \cdot \sum_{j=0}^k (-1)^j \cdot \binom{n}{j} \cdot \frac{(n + \lambda)_j}{\left(\frac{1}{2}\right)_j} \cdot \sinh^{2j}(\alpha \cdot x). \end{aligned} \quad (3.55)$$

Die ungerade Standardlösung reduziert sich in ähnlicher Art und Weise auf ein Polynom, sofern $a + \frac{1}{2} = -n$ negativ ganzzahlig wird und lautet

$$\begin{aligned} \psi_n^{(U)}(x) &= \cosh^\lambda(\alpha \cdot x) \cdot \sinh(\alpha \cdot x) \cdot {}_2F_1\left(-n, b = n + \lambda + 1; \frac{3}{2}; -\sinh^2(\alpha \cdot x)\right) \\ &= \cosh^\lambda(\alpha \cdot x) \cdot \sum_{j=0}^n (-1)^j \cdot \binom{n}{j} \cdot \frac{(n + \lambda + 1)_j}{\left(\frac{1}{2} + 1\right)_j} \cdot \sinh^{2j+1}(\alpha \cdot x). \end{aligned} \quad (3.56)$$

Tatsächlich verhalten sich die durch (3.54) gegebenen Polynome proportional zu den so genannten „Jacobi-Polynomen“

$$P_n^{\alpha, \beta}(y) = \frac{(\alpha + 1)_n}{n!} \cdot {}_2F_1\left(-n, c + \beta + n; c; \frac{1}{2} \cdot (1 - y)\right). \quad (3.57)$$

Sie gehen als Verallgemeinerung aus den Legendre-Polynomen hervor. Man kann

zeigen (hierfür sei beispielsweise auf [Wil03] verwiesen), dass sich mit

$$\Lambda_N = -N - \lambda = -(N + \lambda) \quad (3.58)$$

die Wellenfunktionen aus (3.56) und (3.56) dann mithilfe der Jacobi-Polynome auch zusammenfassend wie folgt schreiben lassen:

$$\psi_N(x) = 2^N \cdot N! \cdot (-1)^N \cdot \cosh^{N+\lambda}(\alpha \cdot x) \cdot P_N^{\Lambda_N, \Lambda_N}(\tanh(\alpha \cdot x)). \quad (3.59)$$

3.2 Die WKB-Näherung des Pöschl-Teller-Potentials

In diesem Kapitel soll die in Kapitel 2.3 vorgestellte WKB-Näherung auf das Pöschl-Teller-Potential angewandt werden, um die sich aus dem Näherungsverfahren ergebenden Energien der gebundenen Zustände mit den im vorangehenden Kapitel berechneten exakten Energien vergleichen und damit die Güte der WKB-Näherung im Hinblick auf die Anwendung auf das Pöschl-Teller-Potential beurteilen zu können. Zu lösen ist im Folgenden also das Integral

$$\begin{aligned} \mathcal{J} &:= \int_{x_1}^{x_2} p(x) \cdot dx \\ &= \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m \cdot \left(E + \frac{A}{\cosh^2\left(\frac{x}{\varrho}\right)} \right)} \cdot dx \\ &= \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdot \pi \hbar, \end{aligned} \quad (3.60)$$

wobei die in (2.56) eingeführten klassischen Umkehrpunkte x_1 und x_2 sich hierbei mit dem Pöschl-Teller-Potential $V(x)$ aus Gleichung (1.3) über die Bedingung

$$E = V(x_{1,2}) = -\frac{A}{\cosh^2\left(\frac{x_{1,2}}{\varrho}\right)} \quad (3.61)$$

zu

$$x_{1,2} = \varrho \cdot \operatorname{arcosh} \left(\pm \sqrt{-\frac{A}{E}} \right) \quad (3.62)$$

ergeben.

Die Auswertung des in der Bohr-Sommerfeld'schen-Quantisierungsbedingung (3.60) gegebenen Integrals kann nun dadurch erfolgen, dass zunächst das Integral des nach der Energie differenzierten Integranden, d.h. also

$$\begin{aligned}
\frac{d\mathfrak{J}}{dE} &= \frac{d}{dE} \int_{x_1}^{x_2} p(x) \cdot dx = \int_{x_1}^{x_2} \frac{dp(x)}{dE} \cdot dx \\
&= \int_{x_1}^{x_2} \frac{d}{dE} \left[\sqrt{2m \cdot \left(E + \frac{A}{\cosh^2\left(\frac{x}{\varrho}\right)} \right)} \right] \cdot dx \\
&= \int_{x_1}^{x_2} \frac{m}{\sqrt{2m \cdot \left(E + \frac{A}{\cosh^2\left(\frac{x}{\varrho}\right)} \right)}} \cdot dx \quad (3.63)
\end{aligned}$$

berechnet wird.

An dieser Stelle eignet sich eine Substitution der Form

$$u := \sinh\left(\frac{x}{\varrho}\right) \Rightarrow dx = \frac{\varrho \cdot du}{\cosh\left(\frac{x}{\varrho}\right)}, \quad (3.64)$$

um damit (3.63) mithilfe des hyperbolischen Pythagoras

$$\cosh^2\left(\frac{x}{\varrho}\right) = 1 + \sinh^2\left(\frac{x}{\varrho}\right) \Rightarrow \cosh\left(\frac{x}{\varrho}\right) = \sqrt{1 + u^2} \quad (3.65)$$

in folgende Form zu bringen:

$$\begin{aligned}
\frac{d\mathfrak{J}}{dE} &= \int_{x_1}^{x_2} \frac{m \cdot dx}{\sqrt{2m \cdot \left(E + \frac{A}{\cosh^2\left(\frac{x}{\varrho}\right)} \right)}} = \int_{u(x_1)}^{u(x_2)} \frac{m \cdot \varrho \cdot du}{\sqrt{2m \cdot (1 + u^2) \cdot \left(E + \frac{A}{1+u^2} \right)}} \\
&= \frac{m \cdot \varrho}{\sqrt{-2mE}} \cdot \int_{u(x_1)}^{u(x_2)} \frac{du}{\sqrt{-\left(1 + u^2 + \frac{A}{E}\right)}} \\
&= \frac{m \cdot \varrho}{\sqrt{-2mE}} \cdot \int_{u(x_1)}^{u(x_2)} \frac{-i \cdot du}{\sqrt{\left(1 + \frac{A}{E}\right) \cdot \left(1 + \frac{u^2}{1 + \frac{A}{E}}\right)}} \quad (3.66)
\end{aligned}$$

Hierbei wurde an dieser Stelle beachtet, dass nach gebundenen Zuständen - d.h. $E < 0$ - gesucht wird und damit der Ausdruck $\sqrt{-2mE}$ insbesondere reell wird.

Mithilfe einer weiteren Substitution der Form

$$\nu = \frac{u}{\sqrt{1 + \frac{A}{E}}} \Rightarrow du = \sqrt{1 + \frac{A}{E}} \cdot d\nu \quad (3.67)$$

kann (3.66) auf folgendes Integral reduziert werden:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathfrak{J}}{dE} &= -\frac{m \cdot \varrho \cdot i}{\sqrt{-2mE}} \cdot \int_{\nu(u(x_1))}^{\nu(u(x_2))} \frac{d\nu}{\sqrt{1+\nu^2}} \\ &= \frac{m \cdot \varrho}{\sqrt{-2mE}} \cdot \frac{\operatorname{arsinh}(\nu)}{i} \Big|_{\nu(u(x_1))}^{\nu(u(x_2))}. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Die nun nötigen substituierten Umkehrpunkte $\nu(u(x_1))$ und $\nu(u(x_2))$ folgen durch Anwendung der in (3.64) und (3.67) angegebenen Substitutionsvorschriften auf die ursprünglichen klassischen Umkehrpunkte x_1 und x_2 und liefern

$$\nu(u(x_1)) = -\nu(u(x_2)) = -i, \quad (3.69)$$

sodass sich (3.68) mit

$$\operatorname{arsinh}(\pm i) = \pm i \cdot \frac{\pi}{2} \quad (3.70)$$

schlussendlich auf

$$\frac{d\mathfrak{J}}{dE} = \frac{m \cdot \varrho}{\sqrt{-2mE}} \cdot \pi \quad (3.71)$$

reduziert.

Der in (3.71) angegebene Ausdruck kann nun nach der Energie E integriert werden und ergibt (mit der noch zu bestimmenden Integrationskonstante $c \in \mathbb{R}$):

$$\mathfrak{J}(E) = \int \frac{d\mathfrak{J}}{dE} \cdot dE = -\varrho \cdot \pi \cdot \sqrt{-2mE} + c. \quad (3.72)$$

Die Potentialmulde des Pöschl-Teller-Potentials soll - wie bis hierhin betrachtet - symmetrisch um den Ursprung $x = 0$ liegen. Für die Tiefe des Potentials an dieser Stelle gilt - wie in (2.3) und (2.4) beobachtet - dass sie durch den Potentialparameter A festgelegt wird.

Trifft nun an der Stelle $x = 0$ ein (freies) Teilchen der Energie $E = V(0) = -A$ auf die Potentialmulde, so würde an dieser Stelle ein kritischer Grenzfall eintreffen, der bis hierhin nicht in die getätigten Ausführungen einbezogen wurde. Die gesuchte Integrationskonstante c wird daher über die Bedingung

$$\mathfrak{J}(E = -A) = 0 \Rightarrow c = \varrho \cdot \pi \cdot \sqrt{2mA} \quad (3.73)$$

festgelegt.

Die Bohr-Sommerfeld'sche Quantisierungsbedingung nimmt für das Pöschl-Teller-Potential (unter Achtung von (3.60), (3.72) sowie (3.73)) damit die folgende Form an:

$$\frac{\mathfrak{J}(E)}{\pi} = \sqrt{2m} \cdot \varrho \cdot (\sqrt{A} - \sqrt{-E}) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot \hbar. \quad (3.74)$$

Für die Energien E_n der gebundenen Zustände erhält man aus (3.74) als WKB-Näherung des Pöschl-Teller-Potentials mit $n \in \mathbb{N}$ damit

$$E_n = - \left[\sqrt{A} - \frac{(n + \frac{1}{2}) \hbar}{\sqrt{2m} \cdot \varrho} \right]^2 = - \frac{\hbar^2}{2m\varrho^2} \cdot \left[\sqrt{\frac{2mA\varrho^2}{\hbar^2}} - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2. \quad (3.75)$$

Wie schon für die exakte Lösung in Kapitel 3.1.2 diskutiert, muss nun auch hier noch der Parameterbereich für n ermittelt werden, für den die WKB-Methode sinnvoll anwendbar ist. Hierfür ist zu beachten, dass gebundene Zustände betrachtet werden, damit insbesondere also $E_n < 0$ für alle $n \in \mathbb{N}$ gelten muss.

Die in (3.75) angegebene Lösung verschwindet jedoch, sobald

$$\sqrt{\frac{2mA\varrho^2}{\hbar^2}} = n + \frac{1}{2} \Leftrightarrow n = \sqrt{\frac{2mA\varrho^2}{\hbar^2}} - \frac{1}{2} \quad (3.76)$$

gilt. Damit ist n offensichtlich durch den Parameterbereich

$$0 \leq n < \sqrt{\frac{2mA\varrho^2}{\hbar^2}} - \frac{1}{2} \quad (3.77)$$

eingeschränkt. Insbesondere liefert die WKB-Näherung an dieser Stelle ebenfalls, dass nur eine beschränkte Anzahl von gebundenen Zuständen im Pöschl-Teller-Potential existiert.

3.3 Vergleich der beiden Lösungen

Die exakte analytische Lösbarkeit des Pöschl-Teller-Potentials erlaubt es an diesem Punkt, die Güte der WKB-Näherung für das Pöschl-Teller-Potential beurteilen zu können. Aus Gründen der Übersichtlichkeit seien daher an dieser Stelle nochmals die exakten Energien der gebundenen Zustände im Pöschl-Teller-Potential aus (3.51)

$$E_n^{\text{exakt}} = - \frac{\hbar^2}{2m\varrho^2} \cdot \left[\sqrt{\frac{2mA\varrho^2}{\hbar^2} + \frac{1}{4}} - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2 \quad (3.78)$$

sowie die sich aus der WKB-Methode ergebenden Energien aus (3.75)

$$E_n^{\text{WKB}} = - \frac{\hbar^2}{2m\varrho^2} \cdot \left[\sqrt{\frac{2mA\varrho^2}{\hbar^2}} - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2 \quad (3.79)$$

angegeben.

Offensichtlich unterscheiden sich hierbei die beiden Lösungen lediglich dadurch, dass der in der exakten Lösung (3.78) auftretende Radikand um einen (oben grau unterlegten) Summanden von $\frac{1}{4}$ größer ist als der in der WKB-Näherung aufgeführte Radikand. Die WKB-Näherung sollte folglich hinreichend genaue

Ergebnisse für die Energien der gebundenen Zustände liefern, sofern

$$\frac{2mA\varrho^2}{\hbar^2} \gg \frac{1}{4} \quad (3.80)$$

gilt.¹⁶

Dies soll an diesem Punkt auch nochmals graphisch näher untersucht werden. Insbesondere sollen die beiden Potentialparameter A und ϱ hinsichtlich ihrer Bedeutung für die Genauigkeit der WKB-Methode untersucht werden. Zu diesem Zweck werden die Konstanten daher anfänglich zu $\hbar = 2m = \varrho = 1$ gewählt, um hiermit den Einfluss der Muldentiefe A auf die WKB-Näherung genauer beleuchten zu können. Durch die Wahl der Konstanten wie dargelegt vereinfachen sich die in (3.78) und (3.79) aufgeführten Beziehungen wie folgt:

$$E_n^{\text{exakt}} = - \left[\sqrt{A + \frac{1}{4}} - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2 \quad (3.81)$$

und

$$E_n^{\text{WKB}} = - \left[\sqrt{A} - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2. \quad (3.82)$$

Da der in (3.81) angegebene zu quadrierende Ausdruck größer als der in (3.82) zu quadrierende Term ist, liegt - aufgrund des sich anschließenden Vorzeichenwechsels - das WKB-Energiespektrum für beliebige Werte von $A > 0$ stets über dem exakten Energiespektrum.

Die in (3.52) und (3.77) aufgeführten Parametereinschränkungen für n lauten hier für den exakten Fall

$$0 \leq n_{\text{exakt}} < -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + A} \quad (3.83)$$

und für den genäherten Fall

$$0 \leq n_{\text{WKB}} < -\frac{1}{2} + \sqrt{A}. \quad (3.84)$$

Interessant sind natürlich hierbei diejenigen Werte von A , für die hinreichend viele gebundene Zustände (in der WKB-Näherung) existieren. Aus der Beziehung

$$-\frac{1}{2} + \sqrt{A} \geq 2 \Rightarrow A \geq \frac{25}{4} = 6,25 \quad (3.85)$$

lässt sich abschätzen, dass hierbei zumindest $A \geq \frac{25}{4}$ gelten muss, damit die WKB-Näherung gültige Aussagen für mindestens zwei gebundene Zustände ($n = 0, 1$) machen kann. Dieser kleinstmögliche Wert von A soll daher an dieser Stelle näher untersucht werden. Im Hinblick auf die exakte Form der oberen Schranke (3.83) lässt sich festhalten, dass hierbei zwar tatsächlich drei gebundene Zustände existieren, der dritte gebundene Zustand ($n = 2$) an dieser Stelle wegen der fehlenden Quantifizierung durch die WKB-Näherung jedoch nicht

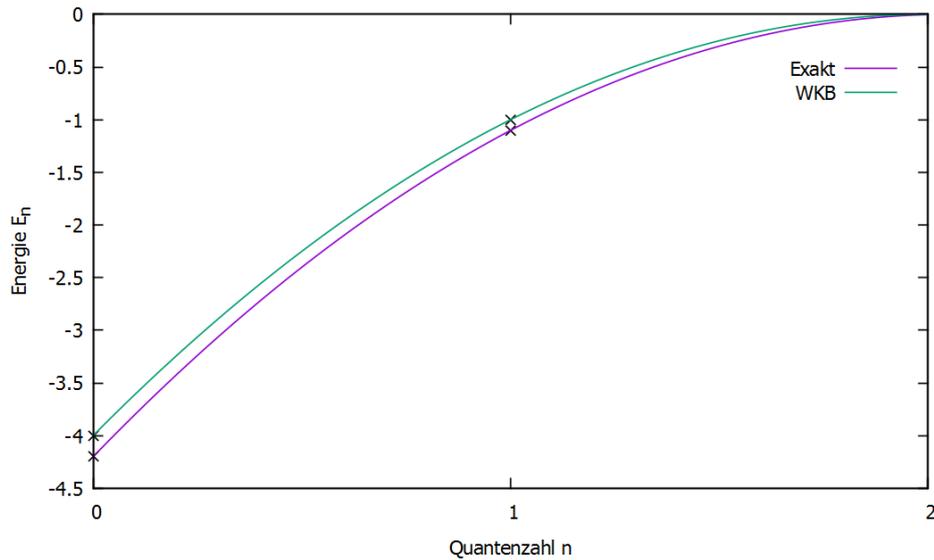


Abbildung 7: Vergleich zwischen dem exakten und dem durch die WKB-Näherung bestimmten Energiespektrum des Pöschl-Teller-Potentials für die Wahl von $A = \frac{25}{4}$. Die obere Grenze für n beträgt hier 1.

Tabelle 1: Gegenüberstellung der exakten und genäherten Energien der gebundenen Zustände des Pöschl-Teller-Potentials für $A = \frac{25}{4}$

	E^{exakt}	E^{WKB}	ΔE
$n = 0$	-4,200	-4,000	0,200
$n = 1$	-1,101	-1,000	0,101

weiter von Relevanz sein soll.

In Abbildung (7) ist das Energiespektrum des Pöschl-Teller-Potentials für den eben vorgestellten Spezialfall $A = \frac{25}{4}$ dargestellt. Das Spektrum des Potentials ist natürlich diskreter Natur, an dieser Stelle jedoch aus Gründen der besseren Darstellbarkeit kontinuierlich abgebildet, wobei die von Bedeutung seienden diskreten Energiewerte explizit gekennzeichnet sind. Der Abbildung ist zu entnehmen, dass die durch die WKB-Näherung gegebenen genäherten Energien der gebundenen Zustände nur leicht nach oben hin¹⁷ von den exakten Energien abweichen. Zu diesem Zweck sind die exakten und die sich aus der WKB-Näherung ergebenden Energien sowie die auftretenden (absoluten) Abweichungen zwischen diesen beiden Energiewerten in der nachfolgenden Tabelle 1 aufgeführt.

¹⁶Der Einfluss des gültigen Parameterbereichs für n fließt in diese erste Feststellung zunächst noch nicht ein, wird aber nachfolgend ebenfalls untersucht werden.

¹⁷Dessen mathematische Ursachen wurden bereits zu Beginn dieser Seite diskutiert.

Zu untersuchen ist nun außerdem, wie sich das Spektrum mit größeren Werten von A - d.h. entsprechend tieferen Potentialmulden - ändert. Zu diesem Zweck werden nun noch die Fälle $A = 10, 20, 28, 50$ sowie $A = 100$ näher betrachtet. Die oberen Schranken für n können mithilfe der in (3.83) und (3.84) angegebenen Beziehungen für das exakte und das genäherte Energiespektrum berechnet werden. Die sich daraus ergebenden maximalen Werte für n sind in der sich anschließenden Tabelle 2 angegeben.

Tabelle 2: Auflistung der oberen Schranken für n für verschiedene Werte der Muldentiefe A

	$n_{\text{oben}}^{\text{exakt}}$	$n_{\text{oben}}^{\text{WKB}}$
$A = 10$	2	2
$A = 20$	3	3
$A = 28$	4	4
$A = 50$	6	6
$A = 100$	9	9

Untersucht werden soll zunächst das in Abbildung (8) dargestellte Energiespektrum für den Fall $A = 10$.

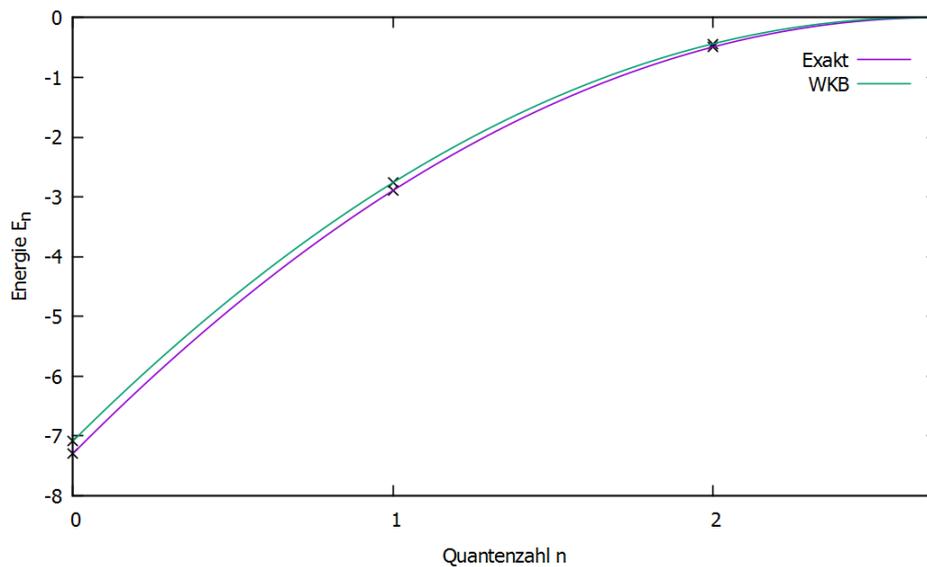


Abbildung 8: Vergleich zwischen dem exakten und dem durch die WKB-Näherung bestimmten Energiespektrum des Pöschl-Teller-Potentials für die Wahl von $A = 10$. Die obere Grenze für n beträgt hier $n = 2$.

Hierbei sind einige grundsätzliche Dinge festzustellen: Zum einen begünstigen tiefere Potentialmulden die Existenz noch stärker gebundener Zustände - stell-

vertretend repräsentiert durch das Auftreten (betragsmäßig) größerer Energien - und zum anderen wird - dadurch bedingt - die relative Abweichung zwischen den mithilfe der WKB-Näherung ermittelten Energien und den exakten Energien (bei eben jenen besonders stark gebundenen Zuständen) deutlich geringer und die absolute Abweichung zwischen den Energien mit steigender Quantenzahl n kleiner. Die Ursache für letztere Feststellung kann mithilfe der in (3.81) und (3.82) angegebenen Beziehungen erklärt werden, da der einzige Unterschied zwischen den beiden Ausdrücken - der Summand $+\frac{1}{4}$ im Radikanden der exakten Lösung - durch steigende Quantenzahlen n zunehmend vernachlässigbar wird. Auch hier bietet es sich daher an, die auftretenden Energiewerte sowie die sich hieraus ergebenden Abweichungen näher zu quantifizieren. Diese sind nachfolgend in Tabelle 3 nochmals aufgeführt. An diesem Punkt ist es mit

Tabelle 3: Gegenüberstellung der exakten und genäherten Energien der gebundene Zustände des Pöschl-Teller-Potentials für $A = 10$

	E^{exakt}	E^{WKB}	ΔE
$n = 0$	-7,298	-7,088	0,210
$n = 1$	-2,895	-2,763	0,132
$n = 2$	-0,492	-0,439	0,053

Blick auf die in den Tabellen 1 und 3 aufgeführten absoluten Abweichungen zwischen den einzelnen Energiespektren sinnvoll, den prinzipiellen Verlauf der absoluten Abweichung als Funktion von A bzw. der Quantenzahl n näher zu betrachten. Hierbei folgt aus den in (3.81) und (3.82) angegebenen Beziehungen ganz grundsätzlich

$$\begin{aligned} \Delta E(A, n) &= |E_n^{\text{exakt}} - E_n^{\text{WKB}}| = 2 \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot \left(\sqrt{A} - \sqrt{A + \frac{1}{4}}\right) + \frac{1}{4} \\ &= -2n \cdot \left(\sqrt{A + \frac{1}{4}} - \sqrt{A}\right) + \left(\sqrt{A} - \sqrt{A + \frac{1}{4}}\right) + \frac{1}{4}, \end{aligned} \quad (3.86)$$

sodass die absolute Abweichung zwischen den beiden Spektren für $n = 0$ lokal maximal wird und linear mit n abnimmt. Dies achtend soll an diesem Punkt eine Abschätzung für die Tiefe der Potentialmulde ermittelt werden, ab der das durch die WKB-Methode ermittelte Spektrum als hinreichend genau angesehen werden kann. Da die auftretenden Energien aber nur bis auf beliebige Konstanten definiert sind (da das Potential seinerseits natürlich entlang der Energieachse verschoben werden kann), erscheint eine Betrachtung der relativen Abweichungen zunächst nur dann sinnvoll, wenn diese Verschiebung in den Betrachtungen berücksichtigt wird. Die absolute Abweichung zwischen den beiden Spektren wird dadurch nicht beeinflusst, da der Einfluss der Energieverschiebung additiv in beiden Energiespektren vorzufinden ist. Sei nachfolgend also das Pöschl-Teller-Potential - wie in Gleichung (1.3) definiert um eine feste Konstante δ_E entlang der Energieachse verschoben, gelte also für das Potential allgemein:

$$V(x) = -\frac{A}{\cosh^2(x)} + \delta_E. \quad (3.87)$$

Diese additive Verschiebung wirkt sich wegen

$$\hat{H}\psi(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) \quad (3.88)$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} - \frac{A}{\cosh^2(x)} + \delta_E \right] \psi(x) = E_{neu} \cdot \psi(x) \quad (3.89)$$

ebenfalls additiv auf das ursprüngliche (exakte) Energiespektrum aus, sodass die Energieeigenwerte (mit $\hbar = 2m = \varrho = 1$ wie gehabt) in diesem Fall durch

$$E_n^{\text{exakt}} = - \left[\sqrt{A + \frac{1}{4}} - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2 + \delta_E \quad (3.90)$$

gegeben sind. Die Bohr-Sommerfeldsche-Quantisierungsbedingung der WKB-Näherung aus (2.57) nimmt unter Berücksichtigung der Energieverschiebung des Potentials damit die folgende Form an:

$$\mathcal{J} = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m \cdot \left(E - \delta_E + \frac{A}{\cosh^2\left(\frac{x}{\varrho}\right)} \right)} \cdot dx \quad (3.91)$$

$$=: \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m \cdot \left(\tilde{E} + \frac{A}{\cosh^2\left(\frac{x}{\varrho}\right)} \right)} \cdot dx \quad (3.92)$$

$$= \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdot \pi \hbar. \quad (3.93)$$

Die WKB-Methode für das entlang der Energieachse verschobene Pöschl-Teller-Potential kann also ebenfalls durch die in (3.75) angegebene Beziehung ausgedrückt werden, nun jedoch mit dem Unterschied, dass hier eine Parameterverschiebung der Form $E \rightarrow \tilde{E}$ durchgeführt werden muss. Insbesondere liefert die WKB-Näherung (mit entsprechend gewählten Potentialparametern wie bisher) somit das Energiespektrum

$$E_n^{\text{WKB}} = - \left[\sqrt{A} - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2 + \delta_E. \quad (3.94)$$

Die relative Abweichung zwischen den beiden Spektren (für $n = 0$) kann damit also über die Beziehung

$$\frac{\Delta E(A, n = 0)}{E_{n=0}^{\text{exakt}}(A)} = \frac{\sqrt{A} - \sqrt{A + \frac{1}{4}} + \frac{1}{4}}{\delta_E - \left(\sqrt{A + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} \right)^2} \quad (3.95)$$

angegeben werden. Für die hier beleuchtete Form des Pöschl-Teller-Potentials aus (1.3) folgt mit $\delta_E = 0$ somit

$$\frac{\Delta E(A, n = 0)}{E_{n=0}^{\text{exakt}}(A)} = \frac{\sqrt{A} - \sqrt{A + \frac{1}{4}} + \frac{1}{4}}{- \left(\sqrt{A + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} \right)^2} < 1\% = 0,01, \quad (3.96)$$

sodass die WKB-Näherung (sofern keine Energieverschiebung des Ausgangspotentials vorliegt) für Muldentiefen $A \gtrsim 28$ hinreichend genaue Werte liefern sollte. An dieser Stelle wurde außerdem festgesetzt, dass die relative Abweichung zwischen den Spektren (bei $n = 0$) unter 1% liegen soll.

Abschließend sollen nun noch - für die ursprüngliche Form des Potentials, d.h. $\delta_E = 0$ - die in den Abbildungen 9 - 12 dargestellten Energiedifferenzen zwischen den beiden Spektren für die Fälle $A = 20$, $A = 28$, $A = 50$ sowie $A = 100$ explizit untersucht werden.¹⁸ Für den Fall $A = 100$ speziell sind - zwecks Veranschaulichung der Güte der WKB-Näherung für besonders große Muldentiefen A - in Abbildung 13 zusätzlich die beiden sich ergebenden Energiespektren aufgetragen.

Es zeigt sich an dieser Stelle ein für verschiedene Werte von A relativ charakteristisches Verhalten der absoluten Abweichungsfunktion in Abhängigkeit von der Hauptquantenzahl n . Unabhängig von der Wahl des Potentialparameters A ist aufgrund des in (3.86) dargestellten Zusammenhanges die absolute Abweichung zwischen den beiden Spektren für $n = 0$ lokal maximal, ehe die Abweichung mit steigender Hauptquantenzahl n weiter abnimmt. Dieses Verhalten ist tatsächlich äußerst charakteristisch für semiklassische Näherungsmethoden, da die auftretenden absoluten Abweichungen mit steigender Hauptquantenzahl n geringer und damit die Näherung besser wird.¹⁹

In Abbildung 13 speziell ist nochmals zwecks Veranschaulichung der Güte der WKB-Näherung für besonders große Werte der Muldentiefe A sowohl das exakte als auch das durch die WKB-Näherung bestimmte Energiespektrum dargestellt. Die beiden Energiespektren sind - im Rahmen der darstellbaren graphischen Genauigkeit - kaum noch voneinander zu trennen, was an dieser Stelle nochmals die hervorragende Güte der WKB-Näherung unterstreicht.

¹⁸Da die einzelnen Energiespektren mitunter gar nicht bzw. nur noch sehr schlecht voneinander zu trennen sind, sollen hier die absoluten Abweichungen für die oben genannten Werte von A über einem geeigneten Maßstab aufgetragen werden.

¹⁹Eine explizite Diskussion der Bedeutung des Potentialparameters ϱ für die Güte der WKB-Näherung erweist sich an dieser Stelle nicht als notwendig, natürlich begünstigen wegen (3.80) große Werte von ϱ - wie auch schon für A - eine entsprechend hinreichend hohe Genauigkeit des WKB-Spektrums.

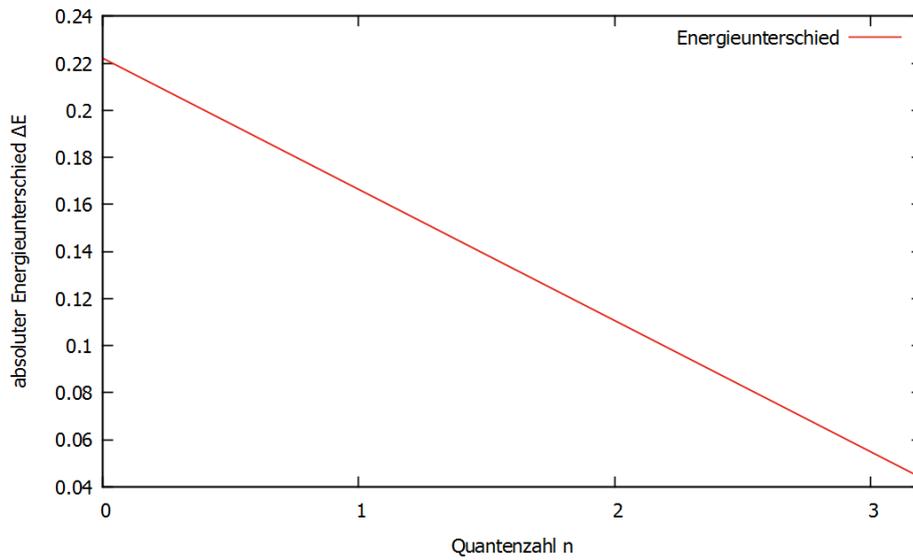


Abbildung 9: Darstellung der absoluten Abweichung zwischen dem exakten und dem durch die WKB-Näherung bestimmten Energiespektrum des Pöschl-Teller-Potentials für die Wahl von $A = 20$. Die obere Grenze für n beträgt hier $n = 3$.

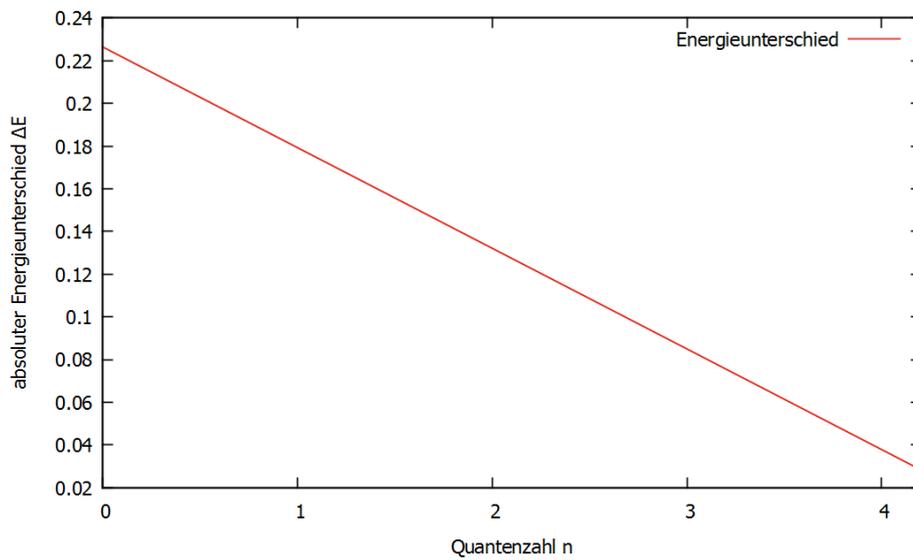


Abbildung 10: Darstellung der absoluten Abweichung zwischen dem exakten und dem durch die WKB-Näherung bestimmten Energiespektrum des Pöschl-Teller-Potentials für die Wahl von $A = 28$. Die obere Grenze für n beträgt hier $n = 4$.

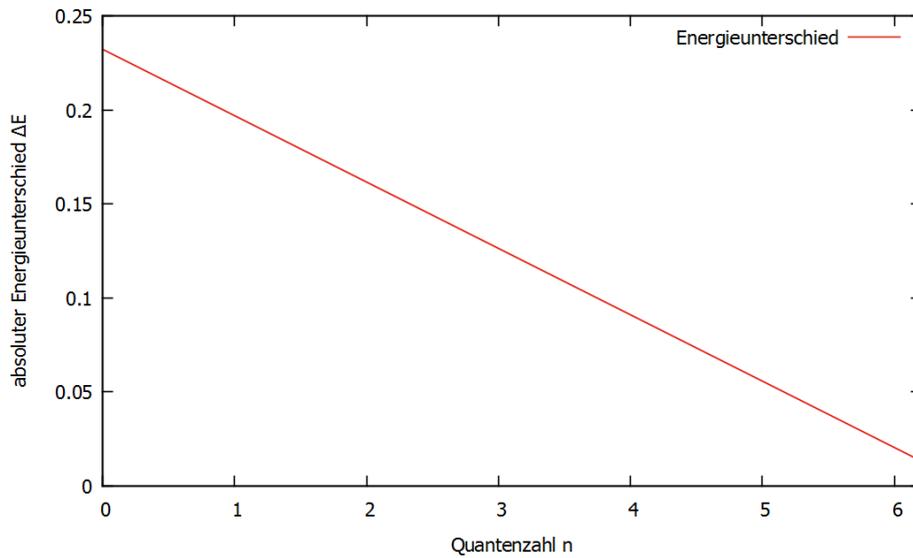


Abbildung 11: Darstellung der absoluten Abweichung zwischen dem exakten und dem durch die WKB-Näherung bestimmten Energiespektrum des Pöschl-Teller-Potentials für die Wahl von $A = 50$. Die obere Grenze für n beträgt hier $n = 6$.

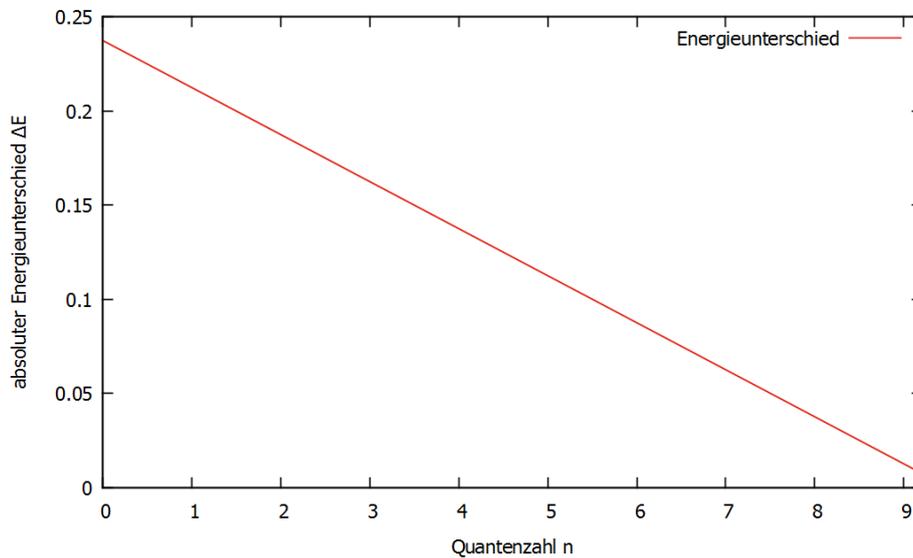


Abbildung 12: Darstellung der absoluten Abweichung zwischen dem exakten und dem durch die WKB-Näherung bestimmten Energiespektrum des Pöschl-Teller-Potentials für die Wahl von $A = 100$. Die obere Grenze für n beträgt hier $n = 9$.

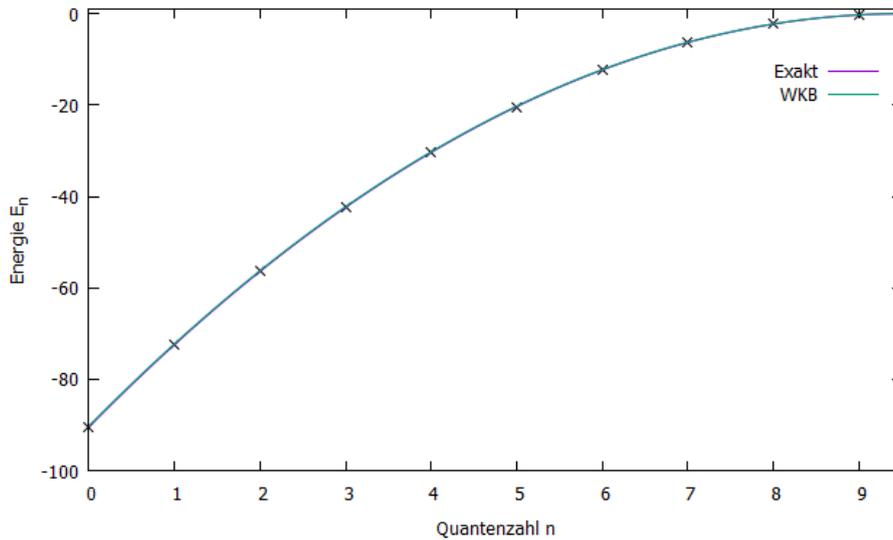


Abbildung 13: Expliziter Vergleich zwischen dem exakten und dem durch die WKB-Näherung bestimmten Energiespektrum des Pöschl-Teller-Potentials für die Wahl von $A = 100$.

3.4 SWKB-Näherung der Pöschl-Teller-Potentials

Abschließend soll an dieser Stelle - unter Achtung der in Kapitel 2.4.3 dargelegten Erkenntnisse und vor dem Hintergrund der in Gleichung (2.90) aufgeführten SWKB-Quantisierungsbedingung auch nochmals die SWKB-Näherung des Pöschl-Teller-Potentials berechnet werden. Die in diesem Kapitel durchgeführte explizite Berechnung der SWKB-Methode stützt sich hierbei weitestgehend auf die in [Sof97] bzw. [Büy09] aufgeführten Ausführungen. Es ist also zunächst das zu nutzende Superpotential zu bestimmen. Wählt man an dieser Stelle für das Superpotential zum Beispiel

$$W = A \cdot \tanh(\alpha \cdot x), \quad (3.97)$$

so ergeben sich die hieraus folgenden Partnerpotentiale V_1 und V_2 aus der in (2.81) aufgeführten Beziehung unter zusätzlicher Achtung von

$$\tanh^2(\alpha \cdot x) = 1 - \frac{1}{\cosh^2(\alpha \cdot x)} \quad (3.98)$$

zu

$$V_{\frac{1}{2}} = \left[A^2 - \frac{A \cdot \left(A \pm \frac{\hbar \cdot \alpha}{\sqrt{2m}} \right)}{\cosh^2(\alpha \cdot x)} \right] = A \cdot \left[A - \frac{\left(A \pm \frac{\hbar \cdot \alpha}{\sqrt{2m}} \right)}{\cosh^2(\alpha \cdot x)} \right]. \quad (3.99)$$

Wählt man nun

$$A = \frac{\hbar \cdot \alpha}{\sqrt{2m}}, \quad (3.100)$$

so folgt

$$\begin{aligned} V_1 &= \frac{\hbar^2 \cdot \alpha^2}{2m} \cdot \left[1 - \frac{2}{\cosh^2(\alpha \cdot x)} \right] = \frac{\hbar^2 \cdot \alpha^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \cdot \alpha^2}{m} \cdot \frac{1}{\cosh^2(\alpha \cdot x)} \\ &=: C - \frac{\bar{A}}{\cosh^2(\alpha \cdot x)}. \end{aligned} \quad (3.101)$$

und

$$V_2 = A^2 = \text{const.} \quad (3.102)$$

Insbesondere ist an dieser Stelle das Potential V_1 aus (3.101) damit als (um $C \in \mathbb{R}$ entlang der Vertikalen verschobenes) Pöschl-Teller-Potential zu identifizieren, sodass es an dieser Stelle gerechtfertigt scheint, die SWKB-Näherung für das durch (3.97) beschriebene Superpotential durchzuführen. Zu lösen ist im Folgenden also das Integral

$$\mathcal{J} = \int_a^b \sqrt{2m \cdot [E_n - A^2 \cdot \tanh^2(\alpha \cdot x)]} \cdot dx. \quad (3.103)$$

Hierbei kann (3.103) mit einer Substitution der Form

$$y := \tanh(\alpha \cdot x) \Rightarrow dx = dy \cdot \frac{\cosh^2(\alpha \cdot x)}{\alpha} \quad (3.104)$$

in

$$\begin{aligned} \mathcal{J} &= \frac{\sqrt{2m}}{\alpha} \cdot A \cdot \int_{y(a)}^{y(b)} \sqrt{\frac{E_n}{A^2} - y^2} \cdot \cosh^2(\alpha \cdot x) \cdot dy \\ &\stackrel{(3.98)}{=} \frac{\sqrt{2m}}{\alpha} \cdot A \cdot \int_{y(a)}^{y(b)} \sqrt{\frac{E_n}{A^2} - y^2} \cdot \frac{1}{1 - y^2} \cdot dy \\ &= \frac{\sqrt{2m}}{\alpha} \cdot A \cdot \int_{y(a)}^{y(b)} \frac{1}{1 - y^2} \cdot \sqrt{\left(\frac{\sqrt{E_n}}{A} - y\right) \cdot \left(y + \frac{\sqrt{E_n}}{A}\right)} \cdot dy \end{aligned} \quad (3.105)$$

überführt werden. Die Integrationsgrenzen können über die in (2.86) aufgeführten Beziehung bestimmt werden. So gelten

$$y(a) = \tanh(a) = \tanh\left(\text{artanh}\left(-\frac{\sqrt{E_n}}{A}\right)\right) = -\frac{\sqrt{E_n}}{A} \quad (3.106)$$

sowie

$$y(b) = \tanh(b) = \tanh\left(\text{artanh}\left(\frac{\sqrt{E_n}}{A}\right)\right) = \frac{\sqrt{E_n}}{A}. \quad (3.107)$$

Das in (3.105) aufgeführte Integral kann an geeigneter Stelle²⁰ nachgeschlagen werden. Man findet hierfür unter Achtung der besonderen Form der Integrationsgrenzen:

²⁰Die Lösung des hier aufgeführten Integrals ist beispielsweise in [Büy09] angegeben.

$$\int_a^b \frac{1}{1-y^2} \cdot \sqrt{(b-y) \cdot (y-a)} \cdot dy = \frac{\pi}{2} \cdot \left[2 - \sqrt{(1-a) \cdot (1-b)} - \sqrt{(1+a) \cdot (1+b)} \right]. \quad (3.108)$$

Damit folgt dann:

$$\begin{aligned} \mathcal{J} &= \frac{\sqrt{2m} \cdot A \cdot \pi}{2 \cdot \alpha} \cdot \left[2 - \sqrt{(1-y(a)) \cdot (1-y(b))} - \sqrt{(1+y(a)) \cdot (1+y(b))} \right] \\ &= \frac{\sqrt{2m} \cdot A \cdot \pi}{2 \cdot \alpha} \cdot \left[2 - \sqrt{1 - \frac{E_n}{A^2}} - \sqrt{1 - \frac{E_n}{A^2}} \right] \\ &= \frac{\sqrt{2m} \cdot A \cdot \pi}{\alpha} \cdot \left[1 - \sqrt{1 - \frac{E_n}{A^2}} \right] = n \cdot \pi \cdot \hbar \end{aligned} \quad (3.109)$$

bzw.

$$E_n = A^2 \cdot \left[1 - \left(1 - \frac{n\hbar\alpha}{\sqrt{2m} \cdot A} \right)^2 \right]. \quad (3.110)$$

Setzen wir nun den in (3.100) definierten Ausdruck für A ein, so folgt letzten Endes:

$$E_n^{\text{SWKB}} = \frac{\hbar^2 \cdot \alpha^2}{2m} \cdot \left[1 - (1-n)^2 \right] = -\frac{\hbar^2 \cdot \alpha^2}{2m} \cdot \left[(1-n)^2 - 1 \right]. \quad (3.111)$$

Tatsächlich ist das hier angegebene Energiespektrum jedoch korrespondierend zu dem in (3.101) angegebenen Potential. Dessen exaktes Energiespektrum ist aufgrund der in (3.51) angegebenen Beziehung bekannt. Man findet so mit den dort definierten Konstanten $\bar{A} = \frac{\hbar^2 \cdot \alpha^2}{m}$ und $C = \frac{\bar{A}}{2}$:

$$\begin{aligned} E_n^{\text{exakt}} &= -\frac{\hbar^2 \cdot \alpha^2}{2m} \cdot \left[\sqrt{\frac{2m\bar{A}}{\hbar^2 \cdot \alpha^2} + \frac{1}{4}} - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2 + C \\ &= -\frac{\hbar^2 \cdot \alpha^2}{2m} \cdot \left[\sqrt{2 + \frac{1}{4}} - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2 + \frac{\hbar^2 \cdot \alpha^2}{2m} \\ &= -\frac{\hbar^2 \cdot \alpha^2}{2m} \cdot \left[(1-n)^2 - 1 \right]. \end{aligned} \quad (3.112)$$

Offensichtlich sind die durch (3.111) und (3.112) gegebenen Energieterme identisch. Da die ursprüngliche Form des Pöschl-Teller-Potentials (1.3) durch einfaches Umskalieren aus dem in (3.101) angegebenen Potential folgt, kann das sich aus der SWKB-Methode ergebende Energiespektrum für die ursprüngliche Form des Pöschl-Teller-Potentials durch

$$\boxed{E_n^{\text{SWKB;PTP}} = -\frac{\hbar^2 \cdot \alpha^2}{2m} \cdot \left[\sqrt{\frac{2mA}{\hbar^2 \cdot \alpha^2} + \frac{1}{4}} - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2 = E_n^{\text{exakt;PTP}}} \quad (3.113)$$

angegeben werden. Die SWKB-Näherung reproduziert folglich die exakten Energieeigenwerte des Pöschl-Teller-Potentials. Dies ist an dieser Stelle jedoch kein Einzelfall. Tatsächlich liefert die SWKB-Methode die exakten Energieeigenwerte beliebiger forminvarianter Potentiale (für den exakten Verweis sei hier beispielsweise auf [Sof97] verwiesen). Die Forminvarianz des Pöschl-Teller-Potentials wird hierbei aus der in (3.99) dargelegten Beziehung durch eine Parameter-verschiebung der Form $A \longrightarrow A - \frac{\hbar \cdot \alpha}{\sqrt{2m}}$ ersichtlich.

4 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit stand die Untersuchung des Pöschl-Teller-Potentials im Vordergrund, für das die zugehörige stationäre Schrödingergleichung - wie in Kapitel 3.1 demonstriert wurde - analytisch exakt lösbar wird. Hierfür wurde die Schrödingergleichung durch geeignete Substitutionen in eine hypergeometrische Differentialgleichung überführt, deren explizite Lösungen in den theoretischen Grundlagen in Kapitel 2.2.2 näher beleuchtet wurden. Die Normierbarkeitsbedingung für die sich damit ergebende gerade bzw. ungerade Standardlösung der Differentialgleichung führte hierbei auf die gesuchten exakten Energien der gebundenen Zustände des Pöschl-Teller-Potentials.

Auf Grundlage der in Kapitel 2.3 vorgestellten und mathematisch aufgearbeiteten WKB-Methode, als deren essenzielles Ergebnis für die Abschätzung der Energien gebundener Zustände die „Bohr-Sommerfeld’sche Quantisierungsbedingung“ resultierte, konnte damit ihre Anwendung auf das Pöschl-Teller-Potential in Kapitel 3.2 erfolgen, ehe sich im Folgekapitel 3.3 ein expliziter Vergleich zwischen der exakten Lösung und der WKB-Näherungslösung anschließen konnte. Hierbei wurde die WKB-Methode als ein semiklassisches Näherungsverfahren kennengelernt, das es (unter Anderem) erlaubt, Abschätzungen für die Energien gebundener Zustände in einem (äußeren) Potential vorzunehmen. Es zeigte sich - mit Blick auf die in 3.3 dargelegten Schilderungen hinsichtlich des Verhaltens der beiden Lösungen für variierende Potentialparameter A - die Güte der WKB-Methode bezüglich ihrer Anwendung auf das Pöschl-Teller-Potential.

Eine mitunter noch bessere Möglichkeit als die WKB-Methode, um die Energien gebundener Zustände eines Potentials abschätzen zu können, wurde mit der SWKB-Näherung kennengelernt. Ihre Herleitung erfolgte unter Achtung der bereits aus der WKB-Methode bekannten Bohr-Sommerfeld’schen Quantisierungsbedingung und vor dem Hintergrund der Supersymmetrie. Im Gegensatz zur WKB-Näherung liefert die SWKB-Näherung nicht nur für größere, sondern auch schon für kleinere Werte von n genauere (für den Grundzustand nach Konstruktion sogar exakte) Energieeigenwerte. Hierbei reproduziert die SWKB-Methode für so genannte forminvariante Potentiale sogar das exakte Energiespektrum. Dies macht sie zu einem äußerst mächtigen Werkzeug in der (supersymmetrischen) Quantenmechanik. Es ergibt sich an dieser Stelle lediglich das Problem, ein geeignetes Superpotential zu finden, jedoch sind bei Bekanntheit dessen in der Regel genauere Ergebnisse als bei der WKB-Methode zu erwarten.

Abschließend bleibt an dieser Stelle die Feststellung, dass es beide Näherungsarten ermöglichen - ohne die Schrödingergleichung überhaupt explizit lösen zu müssen oder mit der grundlegenden mathematischen Theorie der Differentialgleichungen vertraut zu sein - eine Abschätzung der Energien gebundener Zustände vorzunehmen. Sowohl die WKB- als auch die SWKB-Näherung können daher auch für noch komplexere Potentiale probate Näherungsmethoden darstellen, da die zugehörigen Schrödingergleichungen analytisch mitunter nur sehr schwierig lösbar sein können.

Literatur

- [Bal16] Werner Balser. *Differentialgleichungen II*. Vorlesungsskript. Universität Ulm - Institut für Angewandte Analysis, 2010 - Stand: 05.08.2016.
Abrufbar unter:
http://www.mathematik.uni-ulm.de/m5/balser/Skripten/Differentialgl_II.pdf.
- [Büy09] Hale Yilmaz; Dogan Demirhan; Fevzi Büyükkilic. *Solution of the schrödinger equation for two q-deformed potentials by the SWKB method*. J. Math. Chem. 47 (2010) 539-544.
- [D+28] Adalbert Duschek et al. *Mathematische Hilfsmittel in der Physik*. Springer-Verlag, 1928.
- [Flü94] Siegfried Flügge. *Practical Quantum Mechanics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1994.
- [Fun16] Digital Library Of Mathematical Functions. *Chapter 9: Airy and related functions*. 2016 - Stand: 05.08.2016.
Abrufbar unter :
<http://dlmf.nist.gov/9.3.F1.mag>.
- [Gri12] David J. Griffiths. *Quantenmechanik*. Pearson, 2012.
- [Jür88] Detlef Jürgens. *Spezielle Funktionen*. Teubner Verlagsgesellschaft, 1988.
- [Nap11] Jun John Sakurai; Jim Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. Pearson, 2011.
- [Nie78] Michael Martin Nieto. *Exact wave-function normalization constant for the $B_0 \tanh z - U_0 \cosh^{-2} z$ and Pöschl-Teller potentials*. Phys. Rev. A 17 (1978) 1273-1274.
- [Sch98] Franz Schwabl. *Quantenmechanik*. Springer-Verlag, 1998.
- [Sof97] Harald Kalka; Gerhard Soff. *Supersymmetrie*. Teubner Studienbücher, 1997.
- [vD15] Peter van Dongen. *Einführungskurs Mathematik und Rechenmethoden*. Springer-Verlag, 2015.
- [Wil03] Floyd Williams. *Topics in Quantum Mechanics*. Springer Science & Business Media, 2003.

PLAGIATSERKLÄRUNG DES STUDIERENDEN

Hiermit versichere ich, dass die vorliegende Arbeit mit dem Titel

WKB-Näherung und exakte Lösung des Pöschl-Teller-Potentials

selbstständig verfasst worden ist, dass keine anderen Quellen und Hilfsmittel als die angegebenen benutzt worden sind und dass die Stellen der Arbeit, die anderen Werken – auch elektronischen Medien – dem Wortlaut oder Sinn nach entnommen wurden, auf jeden Fall unter Angabe der Quelle als Entlehnung kenntlich gemacht worden sind.

(Datum, Unterschrift)

Ich erkläre mich mit einem Abgleich der Arbeit mit anderen Texten zwecks Auffindung von Übereinstimmungen sowie mit einer zu diesem vorzunehmenden Speicherung der Arbeit in eine Datenbank einverstanden.

(Datum, Unterschrift)