

Berechnung quantenmechanischer
Energieaufspaltung mit der Pfadintegralmethode

Calculation of quantum mechanical energy
splittings by means of path integrals

Thomas Biekötter

17. Mai 2012



Bachelorarbeit

Examensmodul im Studiengang Physik
(Bachelor of Science)

Betreuer: Prof. Dr. Gernot Münster

Institut für theoretische Physik

Zweitkorrektur durch Prof. Dr. Stefan J. Linz

Institut für theoretische Physik

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
1.1	Grundlegendes zu Doppelmuldenpotentialen	1
1.2	Das Pfadintegral	2
1.2.1	Das Euklidische Pfadintegral	3
1.2.2	Semiklassische Näherung	4
1.3	Näherungsformel für Energieaufspaltung	6
2	Das Rechteckpotential	8
2.1	Exakte Lösung	8
2.1.1	Symmetrische Zustände	10
2.1.2	Antisymmetrische Zustände	13
2.2	Energieaufspaltung	16
2.3	Grenzfall: δ -förmiges Potential	20
2.3.1	Symmetrische Zustände	21
2.3.2	Antisymmetrische Zustände	22
3	Näherungsmethode	26
3.1	Führender Term: Gamow-Faktor	26
3.2	Vorfaktor K	26
3.2.1	Potential anpassen	29
3.2.2	Kink-Lösung (Instanton)	30
3.2.3	Was läuft schief?	38
4	Zusammenfassung	40
	Literatur	42

1 Einführung

In dieser Bachelorarbeit wird die quantenmechanische Energieaufspaltung zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand in eindimensionalen symmetrischen Doppelmuldenpotentialen untersucht. Die Energieaufspaltung, also die Differenz der Eigenenergien dieser beiden Zustände, ist sehr gering und Gegenstand aktueller Forschung. Sie bietet unter anderem die Grundlage für den Amoniakmaser (siehe [3]). Dort wird ausgenutzt, dass das Ammoniakmolekül energetisch dicht beieinander liegende Zustände besitzt und durch den Tunneleffekt zwischen ihnen wechseln kann. Da die Energieaufspaltung eng mit dem Tunneleffekt verknüpft ist, findet sich in der Methodik der euklidischen Pfadintegrale ein Zugang, sie systematisch näherungsweise zu berechnen.

Um die Güte einer Näherung einschätzen zu können, ist man auf die Kenntnis der exakten Lösung angewiesen. Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit als Beispiel für ein Doppelmuldenpotential ein Rechteckpotential, genauer gesagt ein unendlich tiefer Potentialtopf, in dessen Mitte ein rechteckiger Potentialwall mit einer bestimmten Höhe dafür sorgt, dass zwei Mulden entstehen, betrachtet. Dieses quantenmechanische System lässt sich mit der üblichen Methode durch Lösen der stationären Schrödingergleichung exakt berechnen. Das Ergebnis kann anschließend mit der Näherung der Pfadintegralmethode verglichen und eventuelle Abweichungen diskutiert werden. Wegen der Unstetigkeiten des Potentials muss damit gerechnet werden, dass die Näherungsmethode ab einer bestimmten Genauigkeit versagt. Ob dies wirklich der Fall ist, wird diese Arbeit zeigen. In jedem Fall kann die Pfadintegralmethode aber ein tieferes physikalisches Verständnis der Energieaufspaltung liefern, da sich führende Terme mit bekannten Formeln aus der Theorie des quantenmechanischen Tunnelns identifizieren lassen. Das folgende Kapitel gibt eine Einführung in Doppelmuldenpotentiale. Danach wird die Pfadintegralmethode eingeführt, mit deren Hilfe sich eine Näherungsformel für die Energieaufspaltung ermitteln lässt.

1.1 Grundlegendes zu Doppelmuldenpotentialen

Die folgenden grundlegenden Eigenschaften symmetrischer Doppelmuldenpotentiale sind in [3] nachzulesen. Ein symmetrisches Doppelmuldenpotential, wie es schematisch in Abbildung 1 dargestellt ist, besitzt stationäre Eigenzustände, die entweder symmetrisch oder antisymmetrisch sind. Der Grundzustand $|0\rangle$ und der erste angeregte Zustand $|1\rangle$ sind in Abbildung 2 skizziert. Die Eigenenergien E_0 und E_1 sind ungefähr so groß wie die Energie des Grundzustands der einzelnen Mulde, durch die

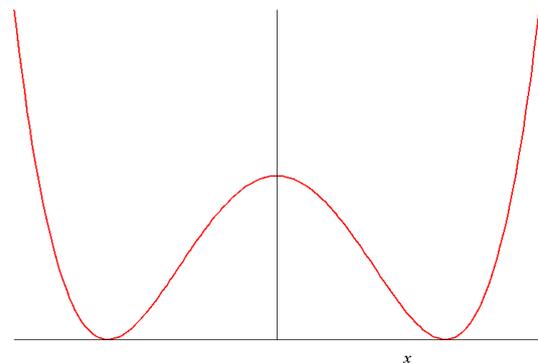


Abbildung 1: Schematische Darstellung eines Doppelmuldenpotentials

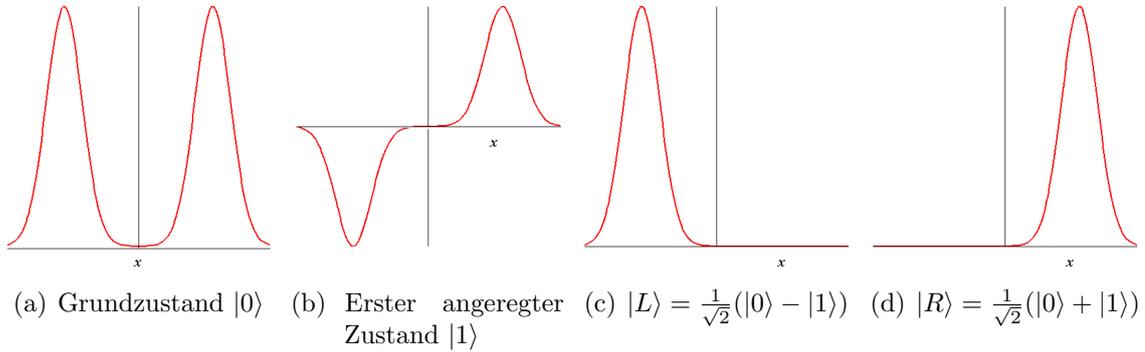


Abbildung 2: Schematische Darstellung

endliche Barriere allerdings nicht exakt gleich. Durch Superposition der beiden Zustände findet man Zustände, bei denen sich das Teilchen hauptsächlich in einer der beiden Mulden aufhält (siehe Abbildung 2 (c) und (d)). Die Energiedifferenz $\Delta E = E_1 - E_0$ hängt offensichtlich mit dem Übergangsmatrixelement zwischen den Zuständen $|L\rangle$ und $|R\rangle$ zusammen

$$\Delta E = -2\langle R|H|L\rangle, \quad (1)$$

wobei H der Hamiltonoperator des Systems ist. Hier wird zum ersten mal der Zusammenhang zwischen Energieaufspaltung und Tunneleffekt deutlich. ΔE wird in dieser Arbeit mit einer Näherungsmethode berechnet, die auf dem quantenmechanischen Pfadintegral beruht. Das nötige Rüstzeug soll in den nächsten Kapiteln eingeführt werden.

1.2 Das Pfadintegral

Die in diesem Kapitel gewählte Einführung des Pfadintegrals ist [3] entnommen. Dort findet sich auch eine explizite Herleitung. \hbar ist im Gegensatz zur Darstellung in [3] nicht gleich 1 gesetzt. Das Pfadintegral erlaubt, die Übergangswahrscheinlichkeit eines Teilchens, das sich zu einem bestimmten Zeitpunkt $t = 0$ am Ort y befindet (Zustand $|y\rangle$), zum Zeitpunkt t an den Ort x (Zustand $|x\rangle$) zu gelangen, zu berechnen. Nach der Schrödingergleichung ist die Übergangsamplitude mit Hilfe des Zeitentwicklungsoperators $U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ durch den Ausdruck $\langle x|U(t)|y\rangle$ formal gegeben. Die Übergangswahrscheinlichkeit ist das Betragsquadrat hiervon. Die Idee bei der Entwicklung des Pfadintegrals ist, dass alle möglichen Wege $x(t)$ mit den Randbedingungen $x(0) = y$ und $x(t) = x$ zur Übergangswahrscheinlichkeit beitragen. Man teilt das Zeitintervall in kleine Abschnitte $\varepsilon = t/N$ und schreibt für den Ort zum Zeitpunkt $r \cdot \varepsilon$ einfach $x(t_r)$. Es gilt nun folgender Zusammenhang:

$$\langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|y\rangle = \int \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar}S[x]} \quad (2)$$

Auf der rechten Seite steht das Pfadintegral. In der Exponentialfunktion im Integrand findet sich die klassische Wirkung als Funktional des Weges x :

$$S[x] = \int_0^t \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2(t') - V(x(t')) \right) dt' \quad (3)$$

Der Ausdruck $\int \mathcal{D}x$ ist als unendlichdimensionale Integration zu verstehen:

$$\int \mathcal{D}x = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} dx(t_1) \cdot \dots \cdot dx(t_{N-1}) \quad (4)$$

Das bedeutet, dass über jeden Weg, der die Randbedingungen erfüllt, integriert wird. Die Grenzwertbildung ist erst nach der Integration durchzuführen. Im Gegensatz zur Formulierung mit der Schrödingergleichung tauchen im Pfadintegral keine Operatoren mehr auf. Dafür muss ein unendlichdimensionales Integral gelöst werden.

Von besonderer Bedeutung ist allerdings die physikalische Interpretation. Für die Übergangswahrscheinlichkeit liefert jeder mögliche Weg einen Beitrag. Der Weg, der klassisch die Newtonsche Bewegungsgleichung erfüllt, und die Wege, die nur leicht von dem klassischen Weg abweichen, haben in semiklassischen Fällen den größten Beitrag, da die Wirkung für den klassischen Weg stationär ist. Wege, die weit vom klassischen Weg abweichen, sorgen für Oszillationen in der Exponentialfunktion, so dass ihre Beiträge sich für semiklassische Fälle approximativ aufheben.

1.2.1 Das Euklidische Pfadintegral

Durch Übergang zu einer imaginären Zeit $\tau = it$ wird aus dem eben vorgestellten Pfadintegral das euklidische Pfadintegral:

$$\langle x | e^{-\frac{1}{\hbar} H \tau} | y \rangle = \int \mathcal{D}x e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[x]} \quad (5)$$

S_E ist die euklidische Wirkung

$$S_E[x] = \int_0^\tau \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2(\tau') + V(x(\tau')) \right) d\tau' \quad (6)$$

und geht durch die Transformation $S_E[x] = -iS|_{t=-i\tau}$ aus der klassischen Wirkung hervor. Das euklidische Pfadintegral hat ganz allgemein den Vorteil, dass es reell ist. Die Beiträge mit großer Abweichung vom klassischen Weg werden exponentiell gedämpft und nicht mehr durch die Oszillation einer komplexen Phase unterdrückt. Speziell erweist sich das euklidische Pfadintegral als günstiger, wenn man Tunneleffekte betrachtet. Durch das quantenmechanische Tunneln können Teilchen an Orte gelangen, die nach klassischer Physik verboten sind. Zum Beispiel könnte ein Teilchen die Potentialbarriere im Doppelmuldenpotential überwinden, obwohl seine Energie kleiner als die Höhe der Barriere ist. Ein klassischer Weg $x(t)$, der diesen Prozess beschreibt, kann allerdings nicht gefunden werden. Schaut man sich aber

die Bewegungsgleichung im euklidischen Raum an, die ganz analog zum Raum mit normaler Zeit t als Funktionalableitung der Wirkung nach dem Weg definiert ist

$$\frac{\delta S_E}{\delta x(\tau)} = 0 \quad \Rightarrow \quad m\ddot{x}(\tau) = \frac{dV}{dx}, \quad (7)$$

fällt das im Vergleich zur normalen Newtonschen Bewegungsgleichung unterschiedliche Vorzeichen vor der Ableitung des Potentials auf. Der Energiesatz wird zu:

$$\frac{m}{2}\dot{x}^2(\tau) - V(x(\tau)) = E_E \quad (8)$$

E_E ist eine Konstante, die als euklidische Energie bezeichnet wird. Anschaulich bedeutet das nichts anderes, als dass sich das Teilchen in dem umgedrehten Potential $-V(x)$ bewegt. In [5] wird dieses Phänomen prägnant folgendermaßen ausgedrückt:

„...in the euclidean dynamics the potential is turned upside down and what ist forbidden in Minkowski space is suddenly allowed in the euclidean region!“ (aus Kapitel 21: „Tunneling by Path Integrals: Well, well!“)

Aus einem Doppelmuldenpotential wird dadurch zum Beispiel ein Potential mit zwei Maxima, die durch eine Mulde getrennt sind. Der Weg durch die Potentialbarriere wird zu einem Weg durch eine Mulde. Den Weg $x_c(\tau)$, der (7) erfüllt, und bei dem sich das Teilchen zu Beginn auf dem einen und zum Schluss auf dem anderen Maximum befindet, nennt man "Kink-Lösung" oder "instanton". Dieser Weg spielt bei der im nächsten Schritt vorgestellten semiklassischen Näherung zur Berechnung eines euklidischen Pfadintegrals im Zusammenhang mit Tunneleffekten eine zentrale Rolle, da für ihn der Weg gefunden ist, bei dem die euklidische Wirkung stationär ist, obwohl klassisch gesehen ein Teilchen diesen Weg gar nicht nehmen kann. Der Kink kann nach (8) durch

$$\tau - \tau_0 = \sqrt{\frac{m}{2}} \int_0^{x_c} \frac{1}{\sqrt{V(x)}} dx \quad (9)$$

berechnet werden, weil durch die Randbedingungen $E_E = 0$ ist. Der Kink ist bis auf eine Konstante τ_0 , die den Nulldurchgang bestimmt, festgelegt. Die selbe Gleichung mit einem Minuszeichen vor dem Integral auf der rechten Seite liefert als Lösung den sogenannten anti-instanton, die sich nur um das Vorzeichen vom instanton unterscheidet und dementsprechend einem Weg von der rechten in die linke Mulde entspricht.

1.2.2 Semiklassische Näherung

Wir haben gesehen, dass das Pfadintegral über alle Wege, die den gleichen Anfangs- und den gleichen Endpunkt haben, integriert werden muss. Dementsprechend ist es unendlichdimensional und so in den meisten Fällen nicht lösbar. Um das euklidische Pfadintegral näherungsweise zu lösen, kann man sich einer semiklassischen

Näherung bedienen, die darin besteht, nur den Weg $x_c(\tau)$ und relativ kleine Abweichungen $y(\tau)$ von diesem Weg bis zur quadratischen Ordnung zu berücksichtigen. Wir werden sehen, dass sich das Pfadintegral so auf Gauß-Integrale zurückführen lässt. Betrachten wir dazu die euklidische Wirkung $S_E[x]$ mit $x(\tau) = x_c(\tau) + y(\tau)$ und den Randbedingungen $y(-\frac{T}{2}) = y(\frac{T}{2}) = 0$, wobei $-\frac{T}{2}$ der Startzeitpunkt ist, und $\frac{T}{2}$ der Zeitpunkt, bei dem das Teilchen den Endpunkt erreicht:

$$\begin{aligned} S_E[x] &= \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau \left\{ \frac{m}{2} (\dot{x}_c + \dot{y})^2 + V(x_c + y) \right\} \\ &= \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau \left\{ \frac{m}{2} (\dot{x}_c^2 + \dot{y}^2 + 2\dot{x}_c\dot{y}) + V(x_c) + V'(x_c) \cdot y + \frac{1}{2} V''(x_c) \cdot y^2 \right\} + \dots \\ &= \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}_c^2 + V(x_c) + m\dot{x}_c\dot{y} + V'(x_c)y + \frac{1}{2} (m\dot{y}\dot{y} + V''(x_c)yy) \right\} + \dots \\ &= \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}_c^2 + V(x_c) + (-m\ddot{x}_c + V'(x_c))y + \frac{1}{2} (m\dot{y}\dot{y} + V''(x_c)yy) \right\} + \dots \end{aligned}$$

Die ersten beiden Terme im Integrand bilden die euklidische Wirkung $S_E[x_c]$ für den Weg x_c . Bei dem folgenden Term wurde die zeitliche Ableitung von y durch partielle Integration auf \dot{x}_c abgewälzt. Dadurch finden wir einen Term proportional zu y , der verschwindet, weil x_c die euklidische Bewegungsgleichung (7) erfüllt. Den letzten Term schreiben wir durch partielle Integration folgendermaßen um:

$$\frac{1}{2} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau \{ m\dot{y}\dot{y} + V''(x_c)yy \} = \frac{1}{2} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau \{ -ym\dot{y} + yV''(x_c)y \} = \frac{1}{2} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} yMy d\tau$$

M ist ein Operator und wirkt auf die Funktion $y(\tau)$, die hinter ihm steht:

$$M = -m \frac{d^2}{d\tau^2} + V''(x_c(\tau)) \quad (10)$$

Die euklidische Wirkung setzt sich demnach aus einem Beitrag von $x_c(\tau)$ und einem Beitrag der Variationen $y(\tau)$ zusammen:

$$S_E[x] = S_E[x_c] + \frac{1}{2} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} yMy d\tau \quad (11)$$

M besitzt eine vollständige und orthonormale Basis aus Eigenfunktionen y_n , so dass gilt:

$$My_n(\tau) = m_n y_n(\tau) \quad \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} y_n(\tau) y_{n'}(\tau) = \delta_{nn'} \quad m_n: \text{Eigenwerte} \quad (12)$$

Entwickeln wir y nach dieser Basis finden wir:

$$\frac{1}{2} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} yMy d\tau = \frac{1}{2} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \sum_{n'=1}^{\infty} c_{n'} y_{n'}(\tau) \left(M \sum_{n=1}^{\infty} c_n y_n(\tau) \right) d\tau = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} m_n c_n^2(\tau)$$

Für das euklidische Pfadintegral bedeutet das Folgendes:

$$\int \mathcal{D}x e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x]} = e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x_c]} \int \mathcal{D}y e^{-\frac{1}{\hbar}\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{\infty} m_n c_n^2}$$

Die Integrationen über die unendlich vielen Variationen $y(\tau)$ können durch die Koeffizienten c_n ausgerückt werden:

$$\mathcal{D}y = J \prod_{n=1}^{\infty} dc_n$$

J ist eine unbekannte Konstante, über die wir an dieser Stelle keine genaueren Angaben machen können. Wir können jetzt aber endlich die Integration ausführen, da wir bei einem Produkt von Gauß-Integralen angelangt sind. Als Ergebnis halten wir fest:

$$\int \mathcal{D}x e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x]} = N e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x_c]} (\det M)^{-\frac{1}{2}} \quad (13)$$

Der Faktor N beinhaltet die Konstante J und die übrigen Konstanten, die durch die Integration auftreten. Mit $\det M$ ist das Produkt der Eigenwerte m_n des Operators M gemeint. Einige Probleme, die bei der Berechnung der Determinante auftreten, werden später genauer diskutiert, wenn wir die Berechnung der Energieaufspaltung im Doppelmuldenpotential betrachten. Unter anderem müssen wir das Problem besprechen, dass einer der Eigenwerte 0 ist, so dass die gesamte Determinante verschwinden würde (siehe dazu auch [1] oder [2]). Wir werden eine Formel nach Coleman kennen lernen, die die Bestimmung der Eigenwerte umgeht. Die Einführung dieser Formel folgt im Kapitel 3.2.

1.3 Näherungsformel für Energieaufspaltung

Das Ziel dieser Arbeit ist, die Anwendbarkeit einer Näherungsformel für die Energieaufspaltung der untersten beiden Zustände in einem symmetrischen Doppelmuldenpotential, die auf der Pfadintegralmethode basiert, bei dem rechteckförmigen Doppelmuldenpotential zu untersuchen. Die Näherungsformel findet sich in [3]:

$$\Delta E \approx 2 \int \mathcal{D}x e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x]} \quad (14)$$

Das Integrationsmaß kann sich an dieser Stelle noch um konstante dimensionsbehaftete Faktoren von dem aus (4) unterscheiden. Da wir aber ohnehin noch auf einen unbekanntem Normierungsfaktor zurückgreifen müssen werden, soll uns das an dieser Stelle nicht weiter stören. Das Pfadintegral geht dabei über alle Wege, die folgende Randbedingungen erfüllen:

$$x\left(-\frac{T}{2}\right) = -a \quad x\left(\frac{T}{2}\right) = a \quad (15)$$

$-a$ und a sind die Orte, an denen das Potential seine Minima hat. Anschließend bildet man den Grenzwert $T \rightarrow \infty$. Eine Begründung dieser Formel findet sich zum Beispiel in [5]. Grundlage ist das Übergangsmatrixelement aus (1).

Aus dem vorigen Kapitel (siehe Gleichung (13)) wissen wir, wie das Pfadintegral in semiklassischer Näherung zu berechnen ist:

$$\Delta E = 2\hbar \cdot e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[x_c]} \cdot (\det M)^{-\frac{1}{2}} \cdot N \quad (16)$$

Der Normierungsfaktor N unterscheidet sich leicht von dem aus (13), weil ein Faktor \hbar eingefügt wurde. Das ist unproblematisch, da N noch nicht näher definiert ist, und erleichtert an späterer Stelle die Einführung einer weiteren Näherung. Der Weg $x_c(\tau)$ ist die Kink-Lösung. Um den ersten Term $\exp(-\frac{1}{\hbar} S_E[x_c])$ zu berechnen, ist es jedoch noch nicht nötig, die genaue Gestalt des Kinks zu kennen. Da wir nämlich wissen, dass $x_c(\tau)$ in der linken Mulde bei $x = -a$ startet und gerade so viel Energie hat, die rechte Mulde bei $x = a$ zu erreichen, ist die euklidische Energie E_E aus Gleichung (8) null:

$$\frac{m}{2} \dot{x}_c^2(\tau) - V(x_c(\tau)) = 0$$

Deswegen ist die Wirkung für den Kink wie folgt gegeben:

$$S_E[x_c] = \int d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}_c^2 + V(x_c) \right\} = \int d\tau m \dot{x}_c^2 = \int_{-a}^a dx_c m \dot{x}_c = \int_{-a}^a dx \sqrt{2mV(x)}$$

Die Näherungsformel für die Energieaufspaltung halten wir schließlich in folgender Form fest:

$$\Delta E = 2\hbar K e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a dx \sqrt{2mV(x)}} \quad \text{mit: } K = N \cdot (\det M)^{-\frac{1}{2}} \quad (17)$$

Interessanterweise taucht an dieser Stelle der Gamow-Faktor auf, der die Wahrscheinlichkeit angibt, dass ein Teilchen mit Energie $E_E = 0$ die Potentialbarriere zwischen $-a$ und a durchtunnelt. Zur Gültigkeit der Näherungsformel gibt [3] an, dass die Formel anwendbar ist, „...wenn ΔE hinreichend klein, bzw. $S_E[x_c]$ hinreichend groß ist.“ (Kapitel 23.2.6: „Beispiel: Energieaufspaltung“)

2 Das Rechteckpotential

Um ein exakt lösbares Doppelmuldenpotential zu erhalten, wird in dieser Arbeit ein kastenförmiges Potential $V(x)$ betrachtet, das folgende Form hat:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & |x| \geq a + b \\ 0 & a < |x| < a + b \\ V_0 & -a \leq x \leq a \end{cases} \quad (18)$$

Das Potential ist durch die Breite des Potentialwalls $2a$ und der Potentialmulden

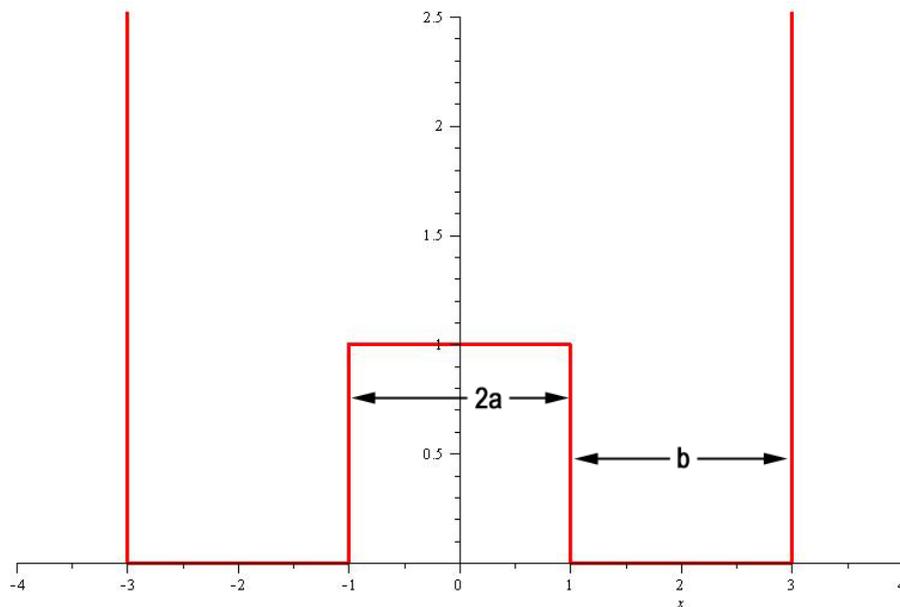


Abbildung 3: Rechteckpotential $V(x)$ für $a = 1$, $b = 2$ und $V_0 = 1$

b sowie der Höhe des Potentialwalls V_0 vollständig charakterisiert. Ein Spezialfall, der später detailliert diskutiert wird, ist der Übergang zu einem unendlich schmalen und unendlich großen Potentialwall ($a \rightarrow 0$, $V_0 \rightarrow \infty$ und $a \cdot V_0 = \text{const.}$).

2.1 Exakte Lösung

Das Potential ist zeitunabhängig, so dass die Wellenfunktionen $\varphi(x)$ aus der stationären Schrödingergleichung

$$H\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (19)$$

ermittelt werden können, also Eigenfunktionen zum Hamiltonoperator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (20)$$

sind. Interessant sind die Zustände mit Energien, die kleiner als die Höhe des Potentialwalls sind ($0 < E < V_0$). Aufgrund der Symmetrie des Potentials $V(x) = V(-x)$, sind die Wellenfunktionen entweder symmetrisch oder antisymmetrisch:

$$\varphi(x) = \varphi(-x) \quad \text{oder} \quad \varphi(x) = -\varphi(-x) \quad (21)$$

Wegen der Unstetigkeiten des Potentials wird die Schrödingergleichung abschnittsweise gelöst:

- **Bereich I:** $-(a+b) < x < -a$
- **Bereich II:** $-a \leq x \leq a$
- **Bereich III:** $a < x < a+b$

Die Form der Wellenfunktion wird für die Bereiche einzeln ermittelt. Außerhalb der drei Bereiche ist das Potential unendlich groß, so dass die Wellenfunktion dort verschwindet.

Bereich I: Das Potential ist null. Die Schrödingergleichung nimmt folgende Form an:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x)^I = E \varphi(x)^I \quad (22)$$

Die Lösung ist bekanntlich:

$$\varphi^I(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad \text{mit: } k := \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} > 0 \quad (23)$$

Bereich II: Das Potential ist konstant $V(x) = V_0$. Es ergibt sich:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x)^{II} + V_0 \varphi(x)^{II} = E \varphi(x)^{II} \quad (24)$$

$$\Rightarrow \varphi^{II}(x) = C e^{qx} + D e^{-qx} \quad \text{mit: } q := \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \quad (25)$$

Bereich III: Es ist analog zum Bereich I:

$$\varphi^{III}(x) = F \sin(kx) + G \cos(kx) \quad (26)$$

Die Integrationskonstanten A , B , C , D , F und G sind noch zu bestimmen. Da hier die Ausnutzung der Symmetrien die Rechnung verkürzt, wird nun zwischen den symmetrischen und den antisymmetrischen Zuständen unterschieden.

2.1.1 Symmetrische Zustände

Durch die Symmetrie $\varphi(x) = \varphi(-x)$ ergeben sich die folgenden beiden Bedingungen für die eben aufgestellten Funktionen:

$$\text{a) } \varphi^I(x) = \varphi^{III}(-x) \quad \text{b) } \varphi^{II}(x) = \varphi^{II}(-x) \quad (27)$$

Aus a) folgt:

$$\begin{aligned} A \sin(kx) + B \cos(kx) &= -F \sin(kx) + G \cos(kx) \\ (A + F) \sin(kx) + (B - G) \cos(kx) &= 0 \\ \Rightarrow A &= -F \quad \text{und} \quad B = G \end{aligned}$$

Für die Wellenfunktion aus (26) bedeutet das:

$$\varphi^{III}(x) = -A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (28)$$

Aus b) folgt:

$$\begin{aligned} Ce^{qx} + De^{-qx} &= Ce^{-qx} + De^{qx} \\ (C - D)e^{qx} + (D - C)e^{-qx} &= 0 \\ \Rightarrow C &= D \end{aligned}$$

Im Bereich II haben wir also eine Kosinus Hyperbolicus-förmige Wellenfunktion:

$$\varphi^{II}(x) = 2C \cosh(qx) \quad (29)$$

Drei der sechs gesuchten Konstanten konnten damit bereits eliminiert werden. Für die beiden nächsten benutzen wir die Stetigkeit der Wellenfunktion an den Stellen, an denen das Potential unstetig ist:

$$\text{c) } \varphi^I(-(a+b)) = 0 \quad \text{d) } \varphi^I(-a) = \varphi^{II}(-a) \quad (30)$$

Aus c) folgt:

$$\begin{aligned} A \sin(-k(a+b)) + B \cos(-k(a+b)) &= 0 \\ B &= A \tan(k(a+b)) \end{aligned}$$

Aus d) folgt:

$$\begin{aligned} A(\sin(-ka) + \tan(k(a+b)) \cos(-ka)) &= 2C \cosh(-qa) \\ A(\tan(k(a+b)) \cos(ka) - \sin(ka)) &= 2C \cosh(qa) \\ C &= A \frac{\tan(k(a+b)) \cos(ka) - \sin(ka)}{2 \cosh(qa)} \end{aligned}$$

Die Wellenfunktion ist nun bis auf die Normierung bestimmt:

$$\varphi^I(x) = A(\sin(kx) + \tan(k(a+b)) \cos(kx)) \quad (31)$$

$$\varphi^{II}(x) = A \frac{\tan(k(a+b)) \cos(ka) - \sin(ka)}{\cosh(qa)} \cosh(qx) \quad (32)$$

$$\varphi^{III}(x) = -A(\sin(kx) - \tan(k(a+b)) \cos(kx)) \quad (33)$$

Ohne die genaue Rechnung sei noch der Normierungsfaktor A angegeben, den man aus der Normierungsbedingung $\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1$ erhält:

$$\begin{aligned} A = & \left[b + \frac{1}{2k} (\sin(2ka) - \sin(2k(a+b))) + \frac{2}{k} \tan(k(a+b)) (\sin^2(ka) - \sin^2(k(a+b))) \right. \\ & + \tan^2(k(a+b))b + \frac{1}{2k} \tan^2(k(a+b)) (\sin(2k(a+b)) - \sin(2ka)) \\ & \left. + \left(\frac{\tan(k(a+b)) \cos(ka) - \sin(ka)}{\cosh(qa)} \right)^2 \left(a + \frac{1}{2q} \sinh(2qa) \right) \right]^{-\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Viel wichtiger ist die Bestimmungsgleichung für die erlaubten Werte von k bzw. die erlaubten Energieniveaus. Dazu nutzen wir die Stetigkeit der ersten Ableitung der Wellenfunktion an der Stelle $x = -a$. Das ist erlaubt, da der Sprung des Potentials von endlicher Höhe ist. Es muss gelten:

$$\frac{d}{dx} \varphi^I(x) \Big|_{x=-a} = \frac{d}{dx} \varphi^{II}(x) \Big|_{x=-a} \quad (34)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow Ak(\cos(kx) - \tan(k(a+b)) \sin(kx)) \Big|_{x=-a} = \\ Aq \left(\frac{\tan(k(a+b)) \cos(ka) - \sin(ka)}{\cosh(qa)} \sinh(qx) \right) \Big|_{x=-a} \end{aligned}$$

$$k(\cos(ka) + \tan(k(a+b)) \sin(ka)) = q \frac{\sin(ka) - \tan(k(a+b)) \cos(ka)}{\cosh(qa)} \sinh(qa)$$

$$k \frac{\cos(ka) + \tan(k(a+b)) \sin(ka)}{\sin(ka) - \tan(k(a+b)) \cos(ka)} = q \tanh(qa)$$

Im Prinzip ist das die gesuchte Bestimmungsgleichung für k , wenn man bedenkt, dass q nach Definition (25) direkt mit k zusammenhängt:

$$q = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2} \quad (35)$$

Der Bruch auf der rechten Seite lässt sich mit Hilfe der Additionstheoreme für Sinus und Kosinus aber noch vereinfachen:

$$\begin{aligned} \frac{\cos(ka) + \frac{\sin(k(a+b))}{\cos(k(a+b))} \sin(ka)}{\sin(ka) - \frac{\sin(k(a+b))}{\cos(k(a+b))} \cos(ka)} &= \frac{\cos(ka) \cos(k(a+b)) + \sin(ka) \sin(k(a+b))}{\sin(ka) \cos(k(a+b)) - \sin(k(a+b)) \cos(ka)} \\ &= \frac{\cos(ka - k(a+b))}{\sin(ka - k(a+b))} = -\cot(kb) \end{aligned}$$

Wir halten schließlich folgendes wichtiges Ergebnis fest:

$$\boxed{-k \cdot \cot(kb) = q \cdot \tanh(qa)} \quad (36)$$

Die Bestimmungsgleichung (36) ist eine transzendente Gleichung, kann dementsprechend analytisch nicht nach k aufgelöst werden. Numerisch sind die Lösungen allerdings beliebig genau berechenbar. In Tabelle 1 sind die niedrigsten drei Lösungen dieser Gleichung zusammen mit der zugehörigen Energie für ein Potential mit $V_0 = 8$ aufgetragen. Die Indizes sind 0, 2 und 4, weil die ungeraden Indizes für die antisymmetrischen Zustände aufgehoben werden. Die Energie aller Zustände ist kleiner als V_0 . Klassisch besteht demnach keine Möglichkeit, das Teilchen im Bereich des Potentialwalls zu detektieren. Quantenmechanisch hat es dort eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit, wie in Abbildung 4 zu erkennen ist. Dort sind die drei Wellenfunktionen aufgetragen. Man sieht, wie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\varphi(x)|^2$ mit zunehmender Energie im klassisch verbotenen Bereich größer wird. Außerdem ist zu erkennen, dass die Anzahl der Nulldurchgänge der Wellenfunktionen gerade so groß wie der Abzählindex der Zustände ist.

Tabelle 1: Kleinste Lösungen k von Gl. (36) und zugehörige Energien für $m = 1$, $\hbar = 1$, $a = 1$, $b = 2$, $V_0 = 8$

Index	k	E
0	1,39279160	0,96993422
2	2,75942277	3,80720702
4	3,96182647	7,84803447

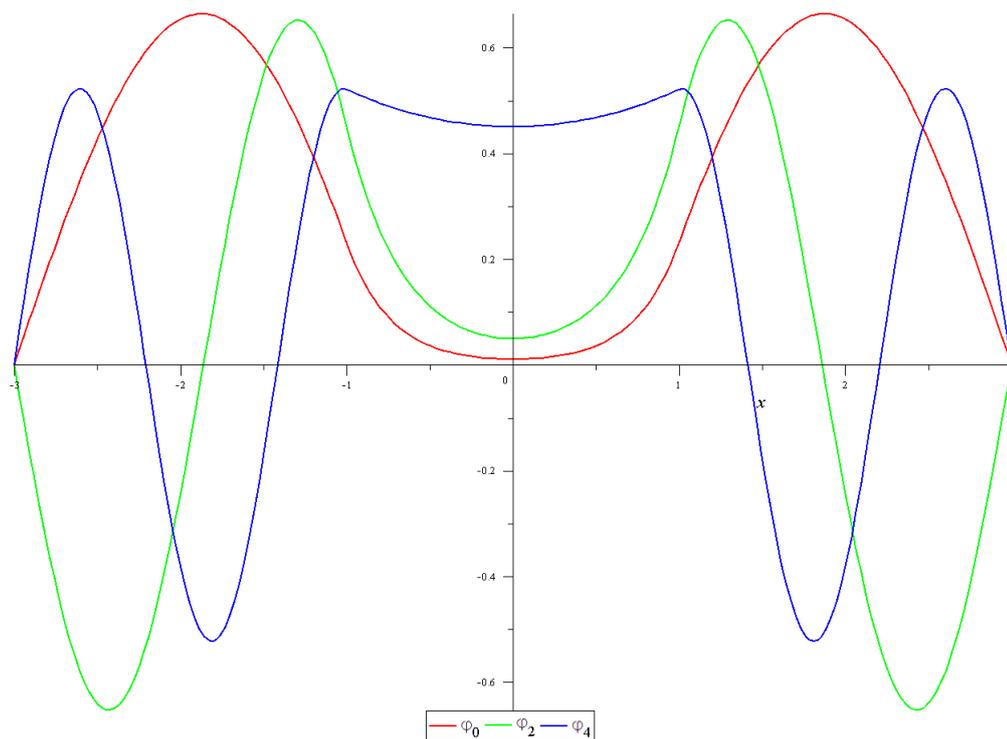


Abbildung 4: Den in Tabelle 1 aufgetragenen Energien zugehörige Wellenfunktionen

2.1.2 Antisymmetrische Zustände

Die Berechnung der antisymmetrischen Zustände ist bis auf die Symmetriebedingung $\varphi(x) = -\varphi(-x)$ analog zu vorhin. Wir starten mit den Darstellungen (23), (25) und (26). Aus

$$\text{a) } \varphi^I(x) = -\varphi^{III}(-x) \quad \text{b) } \varphi^{II}(x) = -\varphi^{II}(-x) \quad (37)$$

folgern wir diesmal:

$$\begin{aligned} \text{a) } \quad & A \sin(kx) + B \cos(kx) = -F \sin(-kx) - G \cos(-kx) \\ & A \sin(kx) + B \cos(kx) = F \sin(kx) - G \cos(kx) \\ & (A - F) \sin(kx) + (B + G) \cos(kx) = 0 \\ & \Rightarrow A = F \quad \text{und} \quad B = -G \end{aligned}$$

Demnach ist nach (26):

$$\varphi_0^{III}(x) = A \sin(kx) - B \cos(kx) \quad (38)$$

$$\begin{aligned} \text{b) } \quad & C e^{qx} + D e^{-qx} = -C e^{-qx} - D e^{qx} \\ & (C + D) e^{qx} + (D + C) e^{-qx} = 0 \\ & \Rightarrow C = -D \end{aligned}$$

Im Bereich II finden wir nach (25) den Sinus Hyperbolicus:

$$\varphi^{II}(x) = 2C \sinh(qx) \quad (39)$$

Die Stetigkeitsbedingungen (30) gelten weiterhin.

Aus c) folgt:

$$\begin{aligned} A \sin(-k(a+b)) + B \cos(-k(a+b)) &= 0 \\ B &= A \tan(k(a+b)) \end{aligned}$$

Aus d) folgt:

$$\begin{aligned} A(\sin(-ka) + \tan(k(a+b)) \cos(-ka)) &= 2C \sinh(-qa) \\ A(\tan(k(a+b)) \cos(ka) - \sin(ka)) &= -2C \sinh(qa) \\ C &= A \frac{\sin(ka) - \tan(k(a+b)) \cos(ka)}{2 \sinh(qa)} \end{aligned}$$

Es ist also:

$$\varphi^I(x) = A(\sin(kx) + \tan(k(a+b)) \cos(kx)) \quad (40)$$

$$\varphi^{II}(x) = A \frac{\sin(ka) - \tan(k(a+b)) \cos(ka)}{\sinh(qa)} \sinh(qx) \quad (41)$$

$$\varphi^{III}(x) = A(\sin(kx) - \tan(k(a+b)) \cos(kx)) \quad (42)$$

Der Vollständigkeit halber sei der Normierungsfaktor angegeben:

$$A = \left[b + \frac{1}{2k} (\sin(2ka) - \sin(2k(a+b))) + \frac{2}{k} \tan(k(a+b)) (\sin^2(ka) - \sin^2(k(a+b))) \right. \\ \left. + \tan^2(k(a+b))b + \frac{1}{2k} \tan^2(k(a+b)) (\sin(2k(a+b)) - \sin(2ka)) \right. \\ \left. + \left(\frac{\sin(ka) - \tan(k(a+b)) \cos(ka)}{\sinh(qa)} \right)^2 \left(-a + \frac{1}{2q} \sinh(2qa) \right) \right]^{-\frac{1}{2}}$$

Wichtig ist aber erneut die Bestimmungsgleichung für die erlaubten k . Sie folgt aus (34):

$$\Rightarrow Ak(\cos(kx) - \tan(k(a+b)) \sin(kx)) \Big|_{x=-a} = \\ Aq \left(\frac{\sin(ka) - \tan(k(a+b)) \cos(ka)}{\sinh(qa)} \cosh(qx) \right) \Big|_{x=-a} \\ k(\cos(ka) + \tan(k(a+b)) \sin(ka)) = q \frac{\sin(ka) - \tan(k(a+b)) \cos(ka)}{\sinh(qa)} \cosh(qa) \\ k \frac{\cos(ka) + \tan(k(a+b)) \sin(ka)}{\sin(ka) - \tan(k(a+b)) \cos(ka)} = q \frac{1}{\tanh(qa)}$$

Auf der linken Seite steht das Gleiche, wie bei der Berechnung der Bestimmungsgleichung für den symmetrischen Fall (36) auftaucht. Auf der rechten Seite steht diesmal allerdings das Inverse des Tangens Hyperbolicus:

$$\boxed{-k \cdot \cot(kb) = q \cdot \coth(qa)} \quad (43)$$

Die niedrigsten drei Lösungen der Bestimmungsgleichung sind in Tabelle 2 dargestellt, nummeriert diesmal mit ungeraden Indizes. Die Abbildung 5 zeigt die zugehörigen Wellenfunktionen. Im Gegensatz zu den symmetrischen Zuständen verschwindet die Wellenfunktion und damit die Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei $x = 0$ gänzlich. Die Indizierung wird verständlich, wenn man die Energien der antisymmetrischen Zustände mit denen der symmetrischen aus Tabelle 1 vergleicht. Der Zustand φ_1 liegt energetisch zwischen den Zuständen φ_0 und φ_2 , der Zustand φ_3 zwischen φ_2 und φ_4 , usw. Außerdem entspricht die Indizierung genau wie bei den symmetrischen Zuständen der Anzahl der Nulldurchgänge der Wellenfunktionen. Angemerkt sei, dass der Zustand φ_5 energetisch über V_0 liegt und wegen Gleichung (25) die Wellenfunktion im Potentialwall wie in den anderen Bereichen die Form einer ebenen Welle hat, da q imaginär wird.

Vergleicht man Tabelle 2 mit Tabelle 1, fällt auf, dass der Abstand der Energien zwischen einem antisymmetrischen Zustand und dem darunter liegenden symmetrischen

Tabelle 2: Kleinste Lösungen k von Gl. (43) und zugehörige Energien für $m = 1$, $\hbar = 1$, $a = 1$, $b = 2$, $V_0 = 8$

Index	k	E
1	1,39311045	0,97037836
3	2,76202979	3,81440428
5	4,03665440	8,14728939

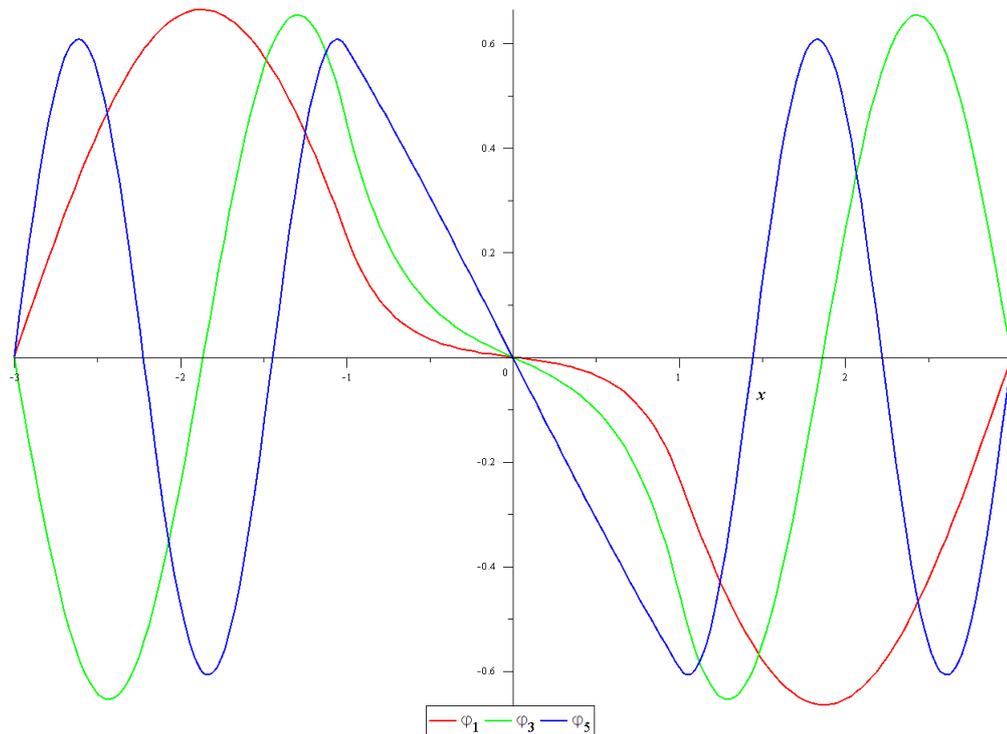


Abbildung 5: Den in Tabelle 2 aufgetragenen Energien zugehörige Wellenfunktionen

Zustand gering ist, wie man es bei einem Doppelmuldenpotential erwartet. Insbesondere beschäftigt sich diese Arbeit mit der Energieaufspaltung $\Delta E = E_1 - E_0$ (siehe Kapitel 1.1). Ihre Abhängigkeiten von den Potentialparametern werden im folgenden Kapitel genau untersucht, um die in der Einführung gemachten Behauptungen über die grundlegenden Eigenschaften symmetrischer Doppelmuldenpotentiale zu verifizieren.

2.2 Energieaufspaltung

Bei symmetrischen Doppelmuldenpotentialen mit endlich hoher Barriere erwarten wir eine Energieaufspaltung zwischen den symmetrischen und antisymmetrischen Zuständen. Durch Lösen der stationären Schrödingergleichung können wir diese Aufspaltung beim Rechteckpotential mit Hilfe der Gleichungen (36) und (43) beliebig genau berechnen. In diesem Kapitel wird das Verhalten der Energieaufspaltung genauer untersucht. Schauen wir uns an, was passiert, wenn die Höhe der Potentialbarriere V_0 größer wird. In Abbildung 6 ist die Energie der ersten vier Zustände in Abhängigkeit von der Höhe der Potentialbarriere V_0 aufgetragen. Man erkennt, wie die Energieaufspaltung zwischen E_0 und E_1 bzw. zwischen E_2 und E_3 mit größer werdendem V_0 immer geringer wird. Beachtet man, dass die Aufspaltung eng mit dem Tunneleffekt zusammenhängt, ist dieses Verhalten nicht verwunderlich, schließlich wird die Tunnelwahrscheinlichkeit durch die Barriere mit zunehmender Höhe geringer. In Abbildung 7 ist die Energieaufspaltung zwischen Grundzustand und erstem angeregten Zustand ΔE gegen V_0 aufgetragen. Im rechten Bild ist ΔE logarithmisch gegen die Wurzel aus der Barrierenhöhe $\sqrt{V_0}$ abgebildet. Dort ist ein weitestgehend linearer Zusammenhang zu erkennen. Nur für sehr kleine V_0 erkennt man eine leichte Krümmung in der Kurve. Das deutet darauf hin, dass näherungsweise

$$\Delta E \sim e^{-C \cdot \sqrt{V_0}} \quad C = \text{const.} \quad (44)$$

ist. Wir werden sehen, ob sich dieses Verhalten mit der Pfadintegralmethode erklären lässt. Zu aller erst schauen wir uns aber an, was mit der Energieaufspaltung passiert, wenn wir den semiklassischen Fall betrachten, also dass gilt:

$$\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2} \gg 1 \quad (45)$$

Wie dieser Term genau zu Stande kommt, wird sich in der späteren Berechnung der Energieaufspaltung mit Hilfe der Pfadintegralmethode zeigen. Vorweg sei erwähnt, dass er sich aus der Bedingung ergibt, dass $S_E[x_c]$ groß wird. Betrachten wir zuerst, was für diesen Fall aus der Bestimmungsgleichung (36) bei symmetrischen Zuständen wird. Auf der rechten Seite steht der Tangens Hyperbolicus. Sein Argument wird

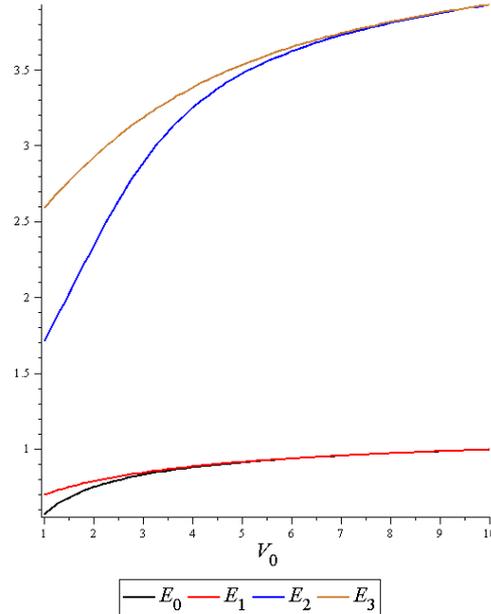


Abbildung 6: Eigenenergien der vier niedrigsten Zustände gegen V_0 ($m = 1$, $\hbar = 1$, $a = 1$, $b = 2$)

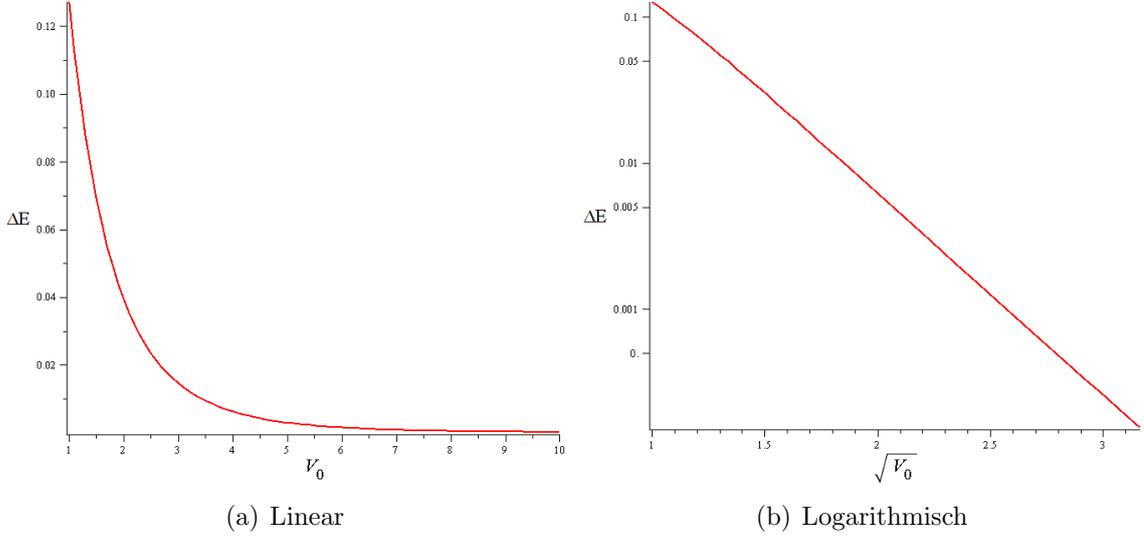


Abbildung 7: Energieaufspaltung ΔE gegen V_0 bzw. $\sqrt{V_0}$ ($m = 1$, $\hbar = 1$, $a = 1$, $b = 2$)

nach (45) sehr groß. Drückt man $\tanh x$ durch die Exponentialfunktion aus, erhält man durch eine Taylor-Entwicklung

$$\tanh x = \frac{1 - e^{-2x}}{1 + e^{-2x}} \approx 1 - 2 \cdot e^{-2x},$$

da e^{-2x} sehr klein wird. Gleichung (36) wird damit zu:

$$\begin{aligned} -k \cdot \cot(kb) &\approx \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2} \cdot (1 - 2 \exp(-2\sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} - k^2 a^2})) \\ -k \cdot \cot(kb) &\approx \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2} \cdot (1 - 2 \exp(-\sqrt{\frac{8mV_0 a^2}{\hbar^2}})) \quad \text{da } \frac{8mV_0 a^2}{\hbar^2} \gg k^2 a^2 \\ -k \cdot \cot(kb) &\approx \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \cdot (1 - 2 \exp(-\sqrt{\frac{8mV_0 a^2}{\hbar^2}})) \quad \text{da } \frac{2mV_0}{\hbar^2} \gg k^2 \end{aligned}$$

Man erkennt, dass die rechte Seite der Gleichung sehr groß wird. Dementsprechend muss auf der linken Seite der Gleichung der Ausdruck $\cot(kb)$ groß werden. Das passiert, wenn das Argument von unten gegen ein Vielfaches von π geht. Deswegen schreiben wir $k = k_s = \frac{\pi j}{b} + \delta k_{js}$ mit einer ganzen Zahl j und $|\delta k_{js}| \ll 1$. Zu beachten ist, dass j hier nicht mit der Indizierung der Zustände aus den vorigen Kapiteln identisch ist. Wiederum durch Taylor-Entwicklung ergibt sich:

$$\cot(k_s b) = \cot(\pi j + \delta k_{js} b) \approx \frac{1}{\delta k_{js} b}$$

Einsetzen liefert einen Ausdruck für δk_{js} :

$$-\left(\frac{\pi j}{b} + \delta k_{js}\right) \frac{1}{\delta k_{js} b} = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2} \cdot (1 - 2 \exp(-\sqrt{\frac{8mV_0 a^2}{\hbar^2}}))$$

$$\frac{\pi j}{\delta k_{js} b^2} = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} (2 \exp(-\sqrt{\frac{8mV_0 a^2}{\hbar^2}}) - 1) - \frac{1}{b}$$

$$\delta k_{js} = \frac{\pi j}{b^2} \left[\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} (2 \exp(-\sqrt{\frac{8mV_0 a^2}{\hbar^2}}) - 1) - \frac{1}{b} \right]^{-1} \quad (46)$$

Eine völlig analoge Rechnung für antisymmetrische Zustände liefert aus Gleichung (43) mit $k = k_a = \frac{\pi j}{b} + \delta k_{ja}$:

$$\delta k_{ja} = \frac{\pi j}{b^2} \left[\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} (-2 \exp(-\sqrt{\frac{8mV_0 a^2}{\hbar^2}}) - 1) - \frac{1}{b} \right]^{-1} \quad (47)$$

Jetzt sind wir in der Lage, die Energieaufspaltung zu berechnen, wobei die quadratischen Terme von δk_{js} und δk_{ja} vernachlässigt werden:

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_a^2 - k_s^2) \approx \frac{\hbar^2 \pi j}{mb} (\delta k_{ja} - \delta k_{js}) \quad (48)$$

Um die Rechnung zu verkürzen, definieren wir:

$$A \equiv 2 \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \exp(-\sqrt{\frac{8mV_0 a^2}{\hbar^2}}) \quad B \equiv -\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} - \frac{1}{b}$$

$$\Rightarrow \delta k_{js} = \frac{\pi j}{b^2} \cdot \frac{1}{A+B} \quad \delta k_{ja} = \frac{\pi j}{b^2} \cdot \frac{1}{B-A} \quad (49)$$

Einsetzen von (49) in (48) führt auf:

$$\Delta E \approx \frac{\hbar^2 \pi^2 j^2}{mb^3} \cdot \left(\frac{1}{B-A} - \frac{1}{B+A} \right)$$

$$\Delta E \approx \frac{\hbar^2 \pi^2 j^2}{mb^3} \cdot \frac{2A}{B^2 - A^2}$$

$$\Delta E \approx \frac{\hbar^2 \pi^2 j^2}{mb^3} \cdot \frac{2 \cdot 2 \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \exp(-\sqrt{\frac{8mV_0 a^2}{\hbar^2}})}{\frac{2mV_0}{\hbar^2} + \sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2 b^2}} + \frac{1}{b^2} - \frac{8mV_0}{\hbar^2} \exp(-2\sqrt{\frac{8mV_0 a^2}{\hbar^2}})}$$

Im Nenner des zweiten Bruches ist der Term $2mV_0/\hbar^2$ dominierend, so dass wir die restlichen Terme vernachlässigen. Damit erhalten wir folgendes kompaktes Ergebnis für die Energieaufspaltung des ersten symmetrischen und ersten antisymmetrischen Zustands ($j = 1$):

$$\Delta E = 2\hbar \tilde{K} \cdot e^{-\sqrt{\frac{8mV_0 a^2}{\hbar^2}}} \quad \text{mit: } \tilde{K} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^3} \sqrt{\frac{8}{V_0 m}} \quad (50)$$

Wir sehen, dass sich unser Ergebnis aus (44) bestätigt. Die Energieaufspaltung nimmt exponentiell mit $\sqrt{V_0}$ ab. Der Vorfaktor C kann abgelesen werden:

$$C = \sqrt{\frac{8ma^2}{\hbar^2}} \quad (51)$$

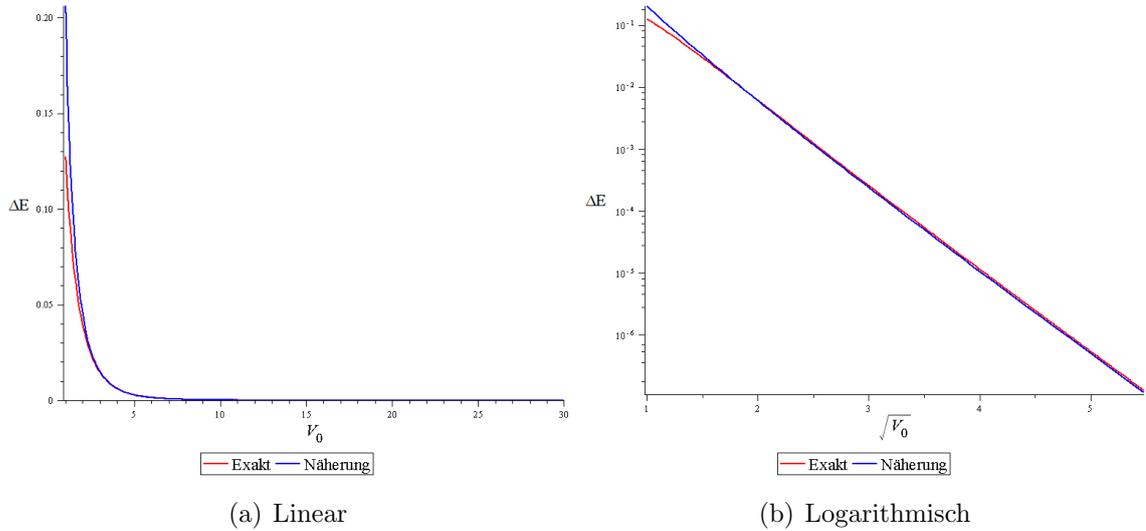


Abbildung 8: Energieaufspaltung ΔE gegen V_0 bzw. $\sqrt{V_0}$ ($m = 1$, $\hbar = 1$, $a = 1$, $b = 2$)

In Abbildung 8 ist das Ergebnis aus Gleichung (50) und die exakte Energieaufspaltung gegen die Barrierenhöhe V_0 aufgetragen. Man erkennt deutlich, wie sich bei größer werdendem V_0 beide Kurven annähern. Das geschieht so rasch, dass ab Werten von ungefähr $V_0 > 5$ die beiden Kurven bei linearer Auftragung gar nicht mehr unterscheidbar sind.

Überraschenderweise können wir im Vorfaktor \tilde{K} die Energie E_0^{PT} des Grundzustandes des unendlich tiefen Potentialtopfs der Breite b finden:

$$\tilde{K} = E_0^{PT} \cdot \sqrt{\frac{8}{V_0 m b^2}} \quad \text{mit: } E_0^{PT} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m b^2} \quad (52)$$

2.3 Grenzfall: δ -förmiges Potential

Ein interessanter Spezialfall eines Doppelmuldenpotentials, der in diesem Unterkapitel betrachtet wird, ist der Übergang zu einem deltafunktionsartigen Potential. Dazu muss beim Rechteckpotential folgender Grenzwert gebildet werden:

$$a \rightarrow 0 \quad V_0 \rightarrow \infty \quad 2aV_0 \equiv D = \text{const.} \quad (53)$$

Es soll an dieser Stelle erwähnt sein, dass dieser Grenzfall nicht dem semiklassischen Grenzfall entspricht, in dem wir gute Ergebnisse durch die Näherungsmethode erwarten. Dafür muss der Term

$$\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2} \gg 1 \quad (54)$$

sein. Hier ist aber:

$$\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2} = \frac{4mD}{\hbar^2}a \rightarrow 0 \quad (55)$$

Das Potential hat nach der Grenzwertbildung folgende Gestalt:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & |x| \geq b \\ D \cdot \delta(x) & |x| < b \end{cases} \quad (56)$$

Taucht die Deltafunktion in einem Potential auf, muss man sich Gedanken über die Stetigkeit der Wellenfunktion und ihrer Ableitung an dieser Stelle machen. Dazu integriert man die stationäre Schrödingergleichung über ein kleines Intervall $[-\varepsilon, \varepsilon]$ um die Stelle $x = 0$. Anschließend lässt man ε gegen 0 gehen.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} dx + \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} D\delta(x)\varphi(x) dx = E \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \varphi(x) dx$$

Wegen der Normierbarkeit der Wellenfunktion muss die rechte Seite der Gleichung verschwinden, da $\varphi(x)$ in dem betrachteten Intervall nicht divergieren kann. Auf der linken Seite können wir die Integration durchführen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d\varphi(x)}{dx} \Big|_{x=\varepsilon} - \frac{d\varphi(x)}{dx} \Big|_{x=-\varepsilon} \right) + D\varphi(0) = 0$$

Lässt man nun ε gegen 0 gehen, kann man die beiden Terme, die die Ableitung der Wellenfunktion enthalten, mit der rechtsseitigen bzw. linksseitigen Ableitung an der Stelle 0 identifizieren:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\varphi'(x)|_{x \searrow 0} - \varphi'(x)|_{x \nearrow 0}) + D\varphi(0) = 0 \quad (57)$$

Man kann an dieser Gleichung erkennen, dass die Ableitung der Wellenfunktion unstetig an der Stelle $x = 0$ ist, wenn die Wellenfunktion dort nicht gleich 0 ist. Da wegen der Normierbarkeit $\varphi(0)$ aber nicht unendlich groß sein kann, ist der Sprung der Ableitung auch nur endlich groß, so dass die Wellenfunktion stetig sein muss. Mit diesem Wissen können wir die Schrödingergleichung lösen. Dazu teilen wir den Abschnitt, in dem die Wellenfunktion nicht verschwindet, wieder in Bereiche auf:

- **Bereich I:** $-b \leq x < 0$
- **Bereich II:** $0 < x \leq b$

In beiden Bereichen ist das Potential null. Die Lösung hierfür kennen wir:

$$\text{Bereich I: } \varphi(x)^I = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (58)$$

$$\text{Bereich II: } \varphi(x)^{II} = C \sin(kx) + D \cos(kx) \quad (59)$$

2.3.1 Symmetrische Zustände

Machen wir uns zuerst wieder die Symmetrie zunutze: $\varphi^I(x) = \varphi^{II}(-x)$

$$\begin{aligned} \Rightarrow A \sin(kx) + B \cos(kx) &= -C \sin(kx) + D \cos(kx) \\ (A + C) \sin(kx) + (B - D) \cos(kx) &= 0 \\ \Rightarrow A = -C \quad \text{und} \quad B &= D \end{aligned}$$

An der Stelle $x = -b$ muss die Wellenfunktion verschwinden:

$$\begin{aligned} A \sin(-kb) + B \cos(-kb) &= 0 \\ B &= A \tan(kb) \end{aligned}$$

Nun kennen wir die Wellenfunktion:

$$\varphi(x)^I = A(\sin(kx) + \tan(kb) \cos(kx)) \quad (60)$$

$$\varphi(x)^{II} = -A(\sin(kx) - \tan(kb) \cos(kx)) \quad (61)$$

Die Normierung ergibt:

$$A = [b - \frac{2}{k} \tan(kb) \sin^2(kb) - \frac{1}{2k} \sin(2kb) + b \cdot \tan^2(kb) + \frac{1}{2k} \tan^2(kb) \sin(2kb)]^{-\frac{1}{2}}$$

Beim Rechteckpotential haben wir die Stetigkeit der Ableitung der Wellenfunktion ausgenutzt, um die erlaubten k zu finden. Jetzt benutzen wir die Unstetigkeit der Ableitung und Gleichung (57). Dazu identifizieren wir:

$$\varphi'(x)|_{x \searrow 0} = \frac{d\varphi^{II}(x)}{dx}|_{x=0} = -Ak \quad \text{und} \quad \varphi'(x)|_{x \nearrow 0} = \frac{d\varphi^I(x)}{dx}|_{x=0} = Ak \quad (62)$$

Mit $\varphi(0) = A \tan(kb)$ folgt:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}(-Ak - Ak) + DA \tan(kb) &= 0 \\ \frac{\hbar^2}{m}k + D \tan(kb) &= 0 \end{aligned}$$

$$\boxed{k \cdot \cot(kb) = -\frac{Dm}{\hbar^2}} \quad (63)$$

Die Richtigkeit dieser Gleichung können wir mit den Ergebnissen von vorhin verifizieren. Sie muss aus Gleichung (36) hervorgehen, wenn man den Limes aus (53) durchführt. Dazu betrachten wir die rechte Seite der Gleichung (36) und benutzen die Reihenentwicklung $\tanh(x) = x + \mathcal{O}(x^3)$:

$$\begin{aligned} q \cdot \tanh(qa) &= \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2} \cdot \tanh\left(\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2} a\right) = \\ &= \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2} \cdot \tanh\left(\sqrt{\frac{mDa}{\hbar^2} - k^2 a^2}\right) = \\ &= \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2} \cdot \sqrt{\frac{mDa}{\hbar^2} - k^2 a^2} + \mathcal{O}(a^{\frac{3}{2}}) = \\ &= \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2} \cdot \sqrt{\frac{mDa}{\hbar^2}} + \mathcal{O}(a) = \\ &= \sqrt{\frac{m^2 D^2}{\hbar^4} - \frac{k^2 m D}{\hbar^2}} a + \mathcal{O}(a) = \\ &= \frac{Dm}{\hbar^2} + \mathcal{O}(\sqrt{a}) \rightarrow \frac{Dm}{\hbar^2} \\ \Rightarrow -k \cdot \cot(kb) &= \frac{Dm}{\hbar^2} \quad \text{analog zu Gleichung (63)!} \end{aligned}$$

In Abbildung 9 ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Grundzustands des δ -Potentials für $b = 3$ und $D = 8$ eingezeichnet. Man erkennt den Knick der Funktion am Ort des δ -Peaks. Außerdem sind die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der fünf Grundzustände des Rechteckpotentials bei unterschiedlicher Potentialwallbreite a und -höhe V_0 eingezeichnet, wobei das Produkt $D = 2aV_0 = 8$ und die Breite $a + b = 3$ konstant gehalten ist. Man erkennt, dass je schmaler und höher der Potentialwall wird, der Grundzustand des Rechteckpotentials sich dem des δ -Potentials immer weiter annähert. Für V_0 wurden folgende fünf Werte verwendet: 3, 4, 8, 16, 32. Außerdem wurde der Einfachheit halber bei der Berechnung der Zustände \hbar und die Masse m gleich 1 gesetzt.

2.3.2 Antisymmetrische Zustände

Betrachten wir nun die antisymmetrischen Wellenfunktionen. Die selbe Rechnung wie im vorigen Kapitel nur mit der Symmetriebedingung $\varphi(x) = -\varphi(x)$ führt auf folgende Wellenfunktion:

$$\varphi(x)^I = A(\sin(kx) + \tan(kb) \cos(kx)) \quad (64)$$

$$\varphi(x)^{II} = A(\sin(kx) - \tan(kb) \cos(kx)) \quad (65)$$

Betrachten wir Gleichung (57) und setzen

$$\varphi'(x)|_{x \searrow 0} = \frac{d\varphi^{II}(x)}{dx} \Big|_{x=0} = Ak \quad \text{und} \quad \varphi'(x)|_{x \nearrow 0} = \frac{d\varphi^I(x)}{dx} \Big|_{x=0} = Ak \quad (66)$$

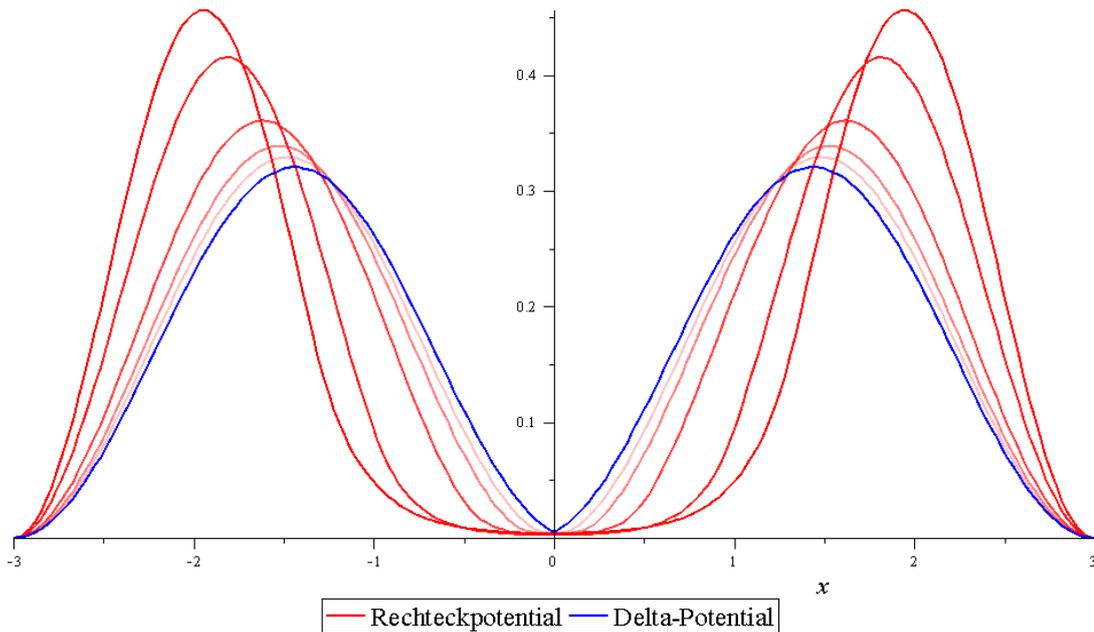


Abbildung 9: Annäherung des Grundzustandes des Rechteckpotentials an den des δ -Potentials

ein:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(Ak - Ak) + D\varphi(0) = 0$$

$$\varphi(0) = 0 \Rightarrow A \tan(kb) = 0$$

Die Bestimmungsgleichung für k ist also einfach:

$$\boxed{\tan(kb) = 0} \quad (67)$$

Deren Lösung können wir ausnahmsweise mal direkt hinschreiben: $k = \frac{\pi n}{b}$, wobei n eine ganze Zahl sein muss. Die Lösung $k = 0$ ist allerdings physikalisch nicht sinnvoll, da dann die gesamte Wellenfunktion verschwindet. Die Wellenfunktion ist nach (67) einfach

$$\varphi(x) = A \cdot \sin(kx) \quad \text{mit: } A = \sqrt{\frac{1}{b}} \quad (68)$$

und entspricht damit den antisymmetrischen Zuständen des unendlich tiefen Potentialtopfs der Breite $2b$. Schließlich machen wir noch den Konsistenzcheck und überprüfen, ob (67) aus (43) hervorgeht:

$$q \cdot \coth(qa) = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2} \cdot \frac{1}{\tanh(\sqrt{\frac{mDa}{\hbar^2} - k^2a^2})} =$$

$$\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\frac{mDa}{\hbar^2} + \mathcal{O}(a)}} =$$

$$\begin{aligned}
\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \cdot \sqrt{\frac{\hbar^2}{mDa}} + \mathcal{O}(a^{-\frac{1}{2}}) &= \\
\frac{1}{a} + \mathcal{O}(a^{-\frac{1}{2}}) &\rightarrow \infty \\
\Rightarrow -k \cdot \cot(kb) \rightarrow \infty &\Rightarrow \frac{1}{k} \tan(kb) = 0 \\
\Rightarrow \tan(kb) = 0 &\text{ analog zu Gleichung (67)!}
\end{aligned}$$

In Abbildung 10 ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des energetisch niedrigsten antisymmetrischen Zustands für $b = 3$ und $D = 8$ eingezeichnet. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen am Ort des δ -Peaks zu finden, ist hier null. Wie bei dem Grundzustand ist zu erkennen, wie sich der energetisch niedrigste antisymmetrische Zustand des Rechteckpotentials an den des δ -Potentials anschmiegt, wenn der Potentialwall schmäler und höher gemacht wird. Die gewählten Werte für V_0 sind hier: 2, 4, 8, 16, 32. Außerdem ist erneut $\hbar = 1$ und $m = 1$. Zu guter Letzt schauen wir uns noch die Energien der untersten vier Zustände bei Variation von $D = 2aV_0$ an. Abbildung 11 zeigt die Energie bei Erhöhung von D . Die Energie der antisymmetrischen Zustände ist nach (67) völlig unabhängig von D , so dass E_1 und E_3 konstant sind. Die Energie der symmetrischen Zustände steigt hingegen mit D und nähert sich der Energie des nächst höheren antisymmetrischen Zustands.

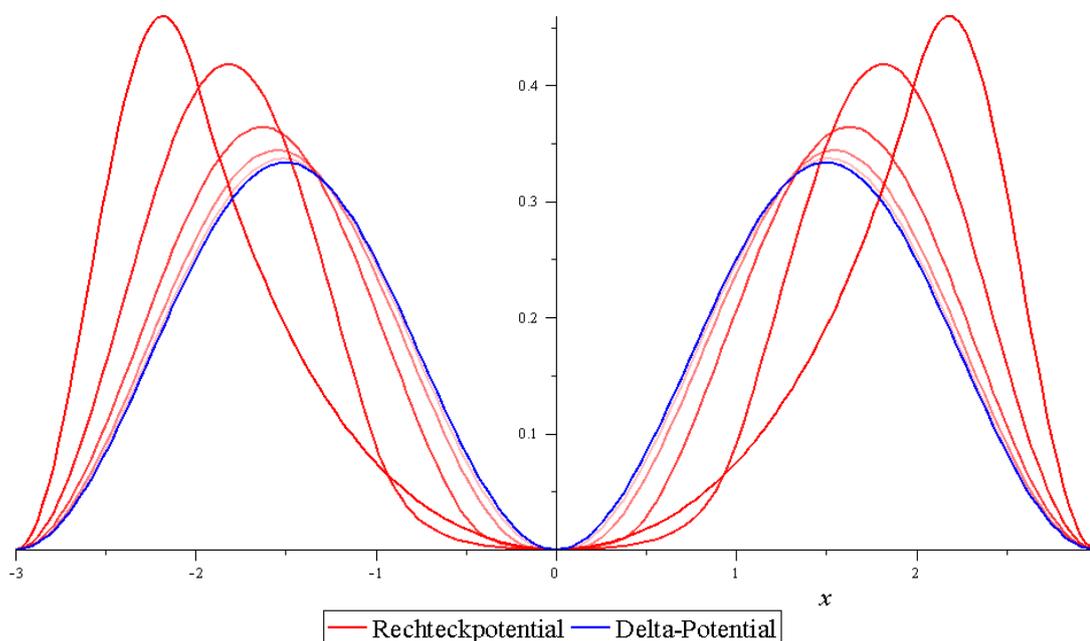


Abbildung 10: Annäherung des untersten antisymmetrischen Zustands des Rechteckpotentials an den des δ -Potentials

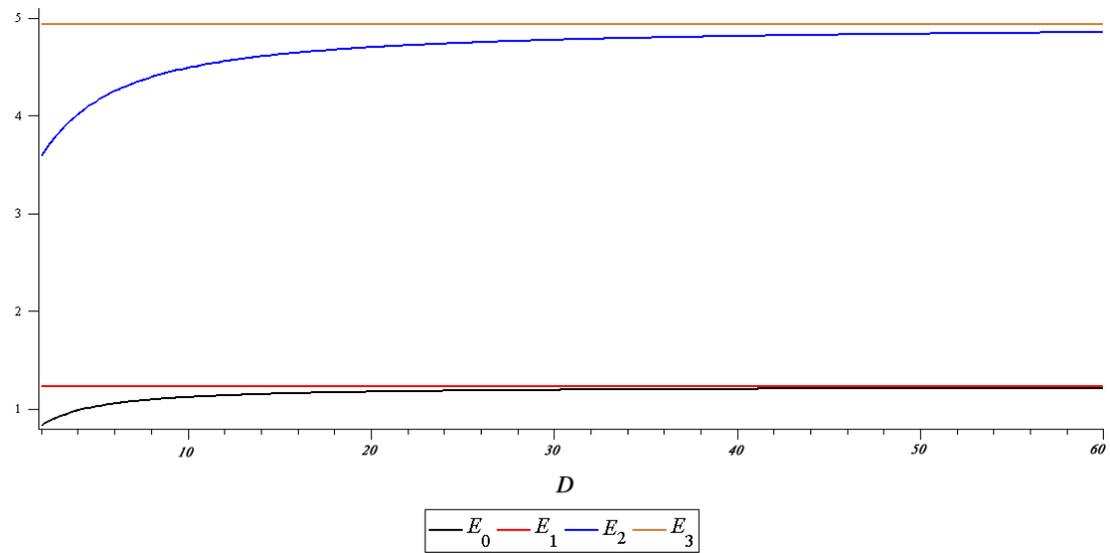


Abbildung 11: Eigenenergien der vier niedrigsten Zustände gegen V_0 ($m = 1, \hbar = 1, b = 2$)

3 Näherungsmethode

Das Rechteckpotential wurde in den vorigen Kapiteln mit Hilfe der Schrödingergleichung untersucht. Insbesondere haben wir die Energieaufspaltung exakt berechnet, wissen also, was wir von der Näherungsmethode erwarten sollten. In diesem Kapitel wird die Pfadintegralmethode auf das rechteckförmige Doppelmuldenpotential angewendet. Bei der Berechnung der Determinante des Operators M wird sich zeigen, dass wir Probleme mit den Unstetigkeiten des Potentials bekommen werden. Deswegen muss das rechteckförmige Potential zuvor durch geeignete quadratische Funktionen an den betreffenden Stellen stetig differenzierbar approximiert werden. Zuerst beginnen wir jedoch mit der weitaus einfacheren Berechnung des führenden Terms der Näherungsformel.

3.1 Führender Term: Gamow-Faktor

Der führende Term der Näherungsformel (17) ist der Gamow-Faktor:

$$e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x_c]} = e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a \sqrt{2mV(x)} dx} \quad (69)$$

Prinzipiell besteht für das rechteckförmige Potential hier das Problem, dass die Mulden keinen ausgezeichneten Punkt besitzen, an dem das Potential das Minimum annimmt, da die Mulden aus einem Bereich der Breite b bestehen, in dem $V(x)=0$ ist. Für die Berechnung von (69) ist es aber sinnvoll, den Muldenort an die Ränder der Potentialbarriere $-a$ und a zu legen, da bei der Kink-Lösung die euklidische Energie E_E null ist. Das bedeutet, dass das Teilchen in dem Potential vor dem Ort $-a$ bzw. hinter a keine Geschwindigkeit hat. Die Vorstellung ist also, dass sich das Teilchen eine Zeit lang am linken Barrierenrand bei $-a$ befindet, zu einem beliebigen Zeitpunkt die Barriere durchtunnelt und sich anschließend für immer am rechten Barrierenrand bei a aufhält. Für das Integral $\int_{-a}^a \sqrt{2mV(x)} dx$ ist es ohnehin unerheblich, wo genau im Muldenbereich das Teilchen startet, weil das Potential erst im Intervall $-a \leq x \leq a$ ungleich null ist. Das Integral zu lösen, ist trivial. Das Potential ist im Intervall konstant: $V(x) = V_0$

$$\int_{-a}^a \sqrt{2mV(x)} dx = \sqrt{2mV_0} \int_{-a}^a dx = \sqrt{2mV_0} \cdot 2a = \sqrt{8mV_0a^2}$$

Wir finden für die Energieaufspaltung:

$$\Delta E = 2\hbar K \cdot e^{-\sqrt{\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}}} \quad (70)$$

3.2 Vorfaktor K

Der Vorfaktor K wird in dieser Arbeit mit einer Formel nach Coleman berechnet, wie sie zum Beispiel in [1] oder in [4] zu finden ist. Diese Einführung richtet sich nach der Darstellung aus dem Buch von Coleman [1]. Halten wir zunächst noch

einmal fest, was genau zu berechnen ist. K beinhaltet die Beiträge des euklidischen Pfadintegrals, die durch die Variation des Weges um den Kink, als Lösung der euklidischen Bewegungsgleichung, entstehen. In Kapitel 1.2.2 wurde gezeigt, dass sich diese Beiträge durch die Determinante eines Operators M quantifizieren lassen. Die Determinante ist das Produkt der Eigenwerte der Eigenwertgleichung (12). M wirkt auf die Funktionen $y(\tau)$, die im Unendlichen verschwinden müssen, da über alle Wege $x(\tau) = x_c(\tau) + y(\tau)$ integriert wurde, wobei der Kink $x_c(\tau)$ nach Voraussetzung die Randbedingung der Näherungsformel (15) bereits erfüllt. Die bei der Berechnung verwendete Formel besagt nun, dass gilt:

$$K = N \cdot (\det M)^{-\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{S_c}{2\pi\hbar \cdot m}} \left(\frac{\det' M}{\det M_0} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (71)$$

Mit $\det' M$ ist das Produkt der Eigenwerte von M bis auf den Eigenwert 0 gemeint. M_0 ist ein von M abgeleiteter Operator und hat folgende Form:

$$M_0 = -m \frac{d^2}{d\tau^2} + m\omega^2 \quad (72)$$

ω ist durch die Krümmung des Doppelmuldenpotentials an den Muldenorten definiert:

$$m\omega^2 = V''(-a) = V''(a) \quad (73)$$

S_c ist die euklidische Wirkung der Kink-Lösung.

Im Gegensatz zu [1] ist hier m und ω nicht gleich 1 gesetzt, so dass sich einige Ausdrücke leicht unterscheiden. Die Herleitung dieser Formel, kann und soll im Rahmen dieser Bachelorarbeit nicht gänzlich reproduziert werden. Auf die wesentlichen Aspekte wird an dieser Stelle aber kurz eingegangen. Betrachten wir zunächst das schon mal angesprochene Problem der Nullmode $y_0(\tau)$, also der Eigenfunktion von M mit Eigenwert 0, die dazu führt, dass das Pfadintegral aus Gleichung (13) ohne einen unendlich kleinen Normierungsfaktor N divergieren würde. Außerdem verschwände die Determinante von M gänzlich. Die erste Frage ist nun, ob diese Nullmode überhaupt existiert. Das lässt sich zeigen, wenn man die euklidische Bewegungsgleichung (7) einmal nach τ differenziert:

$$\begin{aligned} m \frac{d^3}{d\tau^3} x_c(\tau) &= \frac{\partial V'(x_c)}{\partial x_c} \frac{dx_c}{d\tau} \\ -m \frac{d^2}{d\tau^2} \dot{x}_c(\tau) + V''(x_c) \dot{x}_c(\tau) &= 0 \\ M \dot{x}_c(\tau) &= 0 \end{aligned}$$

\dot{x}_c erfüllt die nötigen Randbedingungen der Eigenwertgleichung, da x_c asymptotisch gegen die Muldenorte konvergiert. Die Nullmode entspricht also bis auf Normierung der Geschwindigkeitsfunktion des Kinks im euklidischen Raum. Die Normierung ergibt unter Berücksichtigung von (8) mit $E_E = 0$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dot{x}_c^2(\tau) d\tau = \frac{S_c}{m} \quad \Rightarrow \quad y_0(\tau) = \sqrt{\frac{m}{S_c}} \dot{x}_c(\tau) \quad (74)$$

Die Nullmode existiert und es gilt die eben erwähnten Probleme zu berücksichtigen. Coleman zeigt, dass man in der Determinante den Eigenwert 0 weglassen kann, wenn man stattdessen den Faktor $\sqrt{S_c/(2\pi\hbar m)}$ zu K multipliziert.

Negative Eigenwerte können nicht auftreten. Coleman zeigt das dadurch, dass „...die Eigenfunktion eines eindimensionalen Schrödingeroperators mit dem niedrigsten Eigenwert keine Moden besitzt“ (aus [1], Kapitel: 7.2.2: „The double well and instantons“, Übersetzung vom Verfasser). Da $\dot{x}_c(\tau)$ keine Nullstellen hat, sondern nur in den Grenzen gegen 0 konvergiert, ist der zugehörige Eigenwert 0 der niedrigste Eigenwert im Eigenwertspektrum.

Als nächstes eliminiert Coleman den Normierungsfaktor N , in dem er sich ein Potential mit nur einer Mulde anschaut. Der Weg, der betrachtet wird, ist der, bei dem das Teilchen zu allen Zeiten in der Mulde ruht. Es ist also $x_c = 0$ und aus $V''(x_c)$ wird eine Konstante. Fasst man das Doppelmuldenpotential als Potential mit zwei Einzelmulden bei $x = \pm a$ auf, gelangt man zur Konstante ω . Durch einen Vergleich zwischen Einzelmulden- und Doppelmuldenpotential kann Coleman die Normierung durch die Determinante des Operators M_0 ausdrücken. Es muss lediglich mit der Wurzel aus der Determinante von M_0 multipliziert werden.

Um nun den Ausdruck

$$\frac{\det' M}{\det M_0} \quad (75)$$

zu berechnen, bedient sich Coleman der Gelfand-Yaglam-Methode zur Berechnung der Determinante eines Differentialoperators und entwickelte die Coleman-Affleck-Methode, mit deren Hilfe (75) näherungsweise berechnet werden kann. Es gilt:

$$\frac{\det' M}{\det M_0} = \frac{1}{m\omega} \frac{1}{2(\sqrt{(m/S_c)A})^2} = \frac{S_c}{2m^2\omega A^2} \quad (76)$$

Die Konstante A ist durch die erste Ableitung des Kinks nach τ definiert:

$$y_0(\tau) = \sqrt{\frac{m}{S_c}} \dot{x}_c(\tau) \rightarrow \sqrt{\frac{m}{S_c}} A e^{-\omega|\tau|} \text{ für } \tau \rightarrow \pm\infty \quad (77)$$

Damit vereinfacht sich die Formel (71) zu:

$$K = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} A \quad (78)$$

Zur Qualität dieser Näherungsformel können wir an dieser Stelle keine exakten Angaben machen. Ihre Untersuchung am Beispiel des rechteckförmigen Doppelmuldenpotentials ist eben deshalb der Gegenstand dieser Arbeit. Für stetig differenzierbare Potentiale (zum Beispiel das Potential $V(x) \sim (x^2 - a^2)^2$, wie es in Abbildung 1 zu sehen ist) liefert die Methode aber sehr gute Resultate (siehe zum Beispiel [2]). Man kann vermuten, dass das rechteckförmige Potential durch seine Unstetigkeiten für Probleme sorgt. Der Operator M enthält die zweite Ableitung des Potentials. An dieser Stelle würden also Ableitungen der δ -Funktion auftauchen. Um das zu vermeiden, wird das Potential zuerst regularisiert, wir sorgen also durch eine geeignete

Approximation dafür, dass es stetig differenzierbar wird. Anschließend berechnen wir für diese Approximation die Kink-Lösung und damit den Vorfaktor K . Ganz am Ende bilden wir den Grenzwert, bei dem sich die Approximation des Potentials an die rechteckige Form des ursprünglichen Potentials anschmiegt, und schauen, was sich für K ergibt. An dieser Stelle werden wir sehen, ob die Methode nach Coleman für das Rechteckpotential ein gutes Ergebnis liefert. Bis dahin müssen wir aber noch ein bisschen rechnen.

3.2.1 Potential anpassen

Das Potential soll an den Orten $x = -a$ und $x = a$ stetig differenzierbar sein. Dazu approximieren wir unser Rechteckpotential in den Intervallen $[-a, -a + 2\varepsilon]$ und $[a - 2\varepsilon, a]$ durch quadratische Funktionen. Im Grenzwert $\varepsilon \rightarrow 0$ soll das ursprüngliche Rechteckpotential reproduziert werden können. Die quadratischen Funktionen sollen die Bedingung erfüllen, dass an den Rändern der Intervalle die Steigung verschwindet, so dass zwischen den Intervallen das Potential als konstant angenommen werden kann. Dazu teilen wir die Potentialbarriere in fünf Abschnitte ein (siehe dazu auch Abbildung 12):

- **Bereich I:** $-a \leq x \leq -a + \varepsilon$
- **Bereich II:** $-a + \varepsilon \leq x \leq -a + 2\varepsilon$
- **Bereich III:** $-a + 2\varepsilon \leq x \leq a - 2\varepsilon$
- **Bereich IV:** $a - 2\varepsilon \leq x \leq a - \varepsilon$
- **Bereich V:** $a - \varepsilon \leq x \leq a$

Bereich I: Das Potential ist eine nach oben geöffnete Parabel, die um a nach links verschoben ist:

$$V^I(x) = \frac{V_0}{2\varepsilon^2}(x + a)^2 \quad (79)$$

Der Vorfaktor sorgt dafür, dass $V^I(-a + \varepsilon) = V_0/2$ ist.

Bereich II: Hier ist das Potential eine nach unten geöffnete Parabel, die um $-a + 2\varepsilon$ nach links und um V_0 nach oben verschoben ist:

$$V^{II}(x) = -\frac{V_0}{2\varepsilon^2}(x + (a - 2\varepsilon))^2 + V_0 \quad (80)$$

Durch den Vorfaktor gilt $V^{II}(-a + \varepsilon) = V_0/2$. Automatisch ist die Ableitung an dieser Stelle stetig.

Bereich III: Das Potential ist in diesem Bereich konstant.

$$V^{III}(x) = V_0 \quad (81)$$

Da die Parabel aus Bereich II ihren Scheitelpunkt bei $-a + 2\varepsilon$ hat, verschwindet dort ihre Ableitung, so dass wir durch eine konstante Funktion im Bereich III nicht

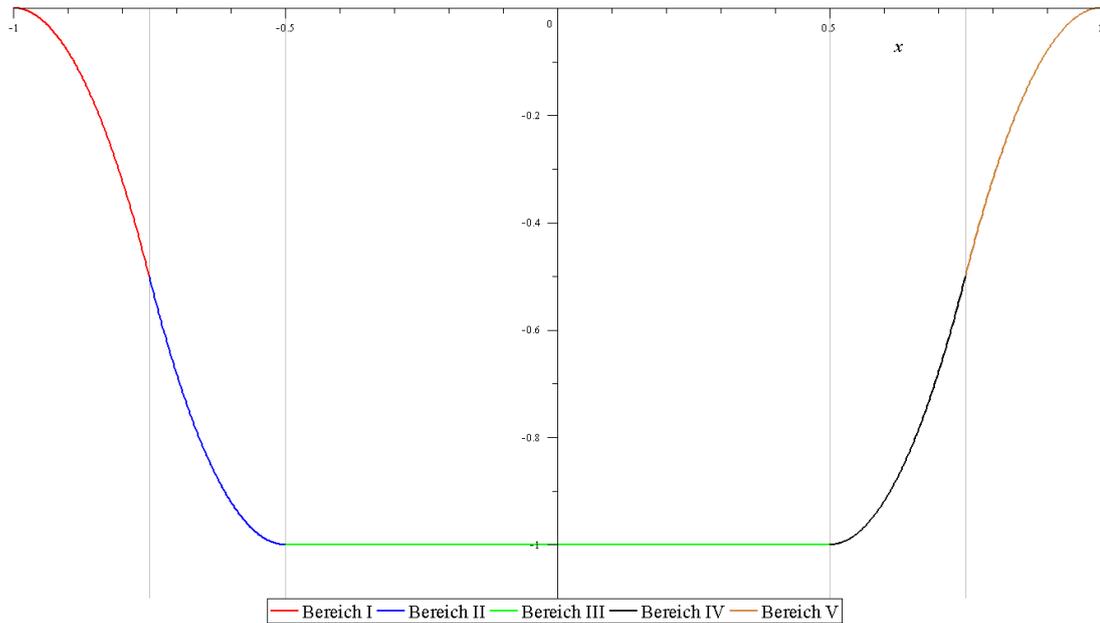


Abbildung 12: Approximation des umgedrehten Potentials $-V(x)$ für $\varepsilon = 0,25$ mit $V_0 = 1$, $a = 1$ und $b = 2$)

die Stetigkeit der Ableitung verletzen.

Bereiche IV und V: Das Potential ergibt sich hier analog zu den Bereichen I und II, nur dass die Parabeln nach rechts verschoben sind:

$$V^{IV}(x) = -\frac{V_0}{2\varepsilon^2}(x - (a - 2\varepsilon))^2 + V_0 \quad (82)$$

$$V^V(x) = \frac{V_0}{2\varepsilon^2}(x - a)^2 \quad (83)$$

In Abbildung 12 ist der approximierte Potentialwall aufgezeichnet. Er steht auf dem Kopf, um anzudeuten, dass wir uns im euklidischen Raum befinden, in dem sich ein Teilchen bekanntlich durch das Potential $-V(x)$ bewegt (siehe Kapitel 1.2.1). Geht $\varepsilon \rightarrow 0$, werden die Bereiche I, II, IV und V immer schmaler, die Parabeln werden steiler und die Approximation nähert sich der rechteckigen Form des ursprünglichen Potentials an.

3.2.2 Kink-Lösung (Instanton)

In diesem Kapitel wird nun der Kink für die Approximation aus dem vorigen Kapitel berechnet. Weil diese abschnittsweise definiert ist, muss der Kink für alle Abschnitte einzeln gefunden werden. Anschließend werden wir die einzelnen Lösungen stetig aneinander fügen. Die Stetigkeit der Ableitung des Kinks ist dann automatisch erfüllt. Prinzipiell ergibt sich der Kink aus Gleichung (9). In dieser Formel steckt allerdings die Randbedingung $x_c(\tau_0) = 0$. Der Nulldurchgang findet bei unserem Potential im

Bereich III statt. Das heißt, dass nur dort die Randbedingung in dieser Form benutzt werden kann. Um den Kink in den anderen Bereichen zu berechnen, werten wir die Differentialgleichung (9) dort zu erst ohne Randbedingung aus. Das führt dazu, dass eine Integrationskonstante auftritt, die im Nachhinein durch Stetigkeitsbedingungen durch τ_0 ausgedrückt wird.

Bereich I: Zu lösen ist die Differentialgleichung:

$$\int d\tau = \sqrt{\frac{m}{2}} \int \frac{1}{\sqrt{V(x)}} dx \quad (84)$$

In diesem Bereich ist $V(x) = V^I(x)$. Wegen $-a < x \leq -a + \varepsilon$ ist $x + a > 0$.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad \tau &= \sqrt{\frac{m\varepsilon^2}{V_0}} \int \frac{1}{x+a} dx + C \\ \sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}} \tau &= \ln(x+a) + C' \\ x+a &= \exp\left(\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau - C'')\right) \end{aligned}$$

Mit $\tau_0^I = C''$, um anzudeuten, dass die Integrationskonstante die Freiheit beinhaltet, den Kink beliebig auf der τ -Achse zu verschieben, finden wir schließlich:

$$x^I(\tau) = \exp\left(\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau - \tau_0^I)\right) - a \quad (85)$$

Bereich II: Es ist $V(x) = V^{II}(x)$.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad \tau &= \sqrt{\frac{m}{2V_0}} \int \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{1}{2\varepsilon^2}(x+a-2\varepsilon)^2}} dx + C \\ \text{Substitution: } z &= \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}(x+a-2\varepsilon) \Rightarrow dx = \sqrt{2\varepsilon} dz \\ \Rightarrow \tau &= \sqrt{\frac{m\varepsilon^2}{V_0}} \int \frac{1}{\sqrt{1-z^2}} dz + C \\ \tau &= \sqrt{\frac{m\varepsilon^2}{V_0}} \arcsin z + C' \\ \arcsin\left(\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}(x+a-2\varepsilon)\right) &= \sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau - C''') \end{aligned}$$

Nun schreiben wir analog $\tau_0^{II} = C'''$ und es ist:

$$x^{II}(\tau) = \sqrt{2\varepsilon} \cdot \sin\left(\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau - \tau_0^{II})\right) - a + 2\varepsilon \quad (86)$$

Bereich III: Wie eben erläutert gilt hier die Randbedingung $x_c(\tau_0) = 0$. Das Potential $V(x) = V^{III}(x)$ ist konstant, die Lösung der Gleichung (9) ist trivial:

$$x^{III}(\tau) = \sqrt{\frac{2V_0}{m}}(\tau - \tau_0) \quad (87)$$

Bereich IV: Das Potential ist $V(x) = V^{IV}(x)$. Die Berechnung des Kinks verläuft bis auf die Substitution

$$z = \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}(x - a + 2\varepsilon)$$

vollkommen analog zu der von Bereich II. Die Lösung ist:

$$x^{IV}(\tau) = \sqrt{2\varepsilon} \cdot \sin\left(\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau - \tau_0^{IV})\right) + a - 2\varepsilon \quad (88)$$

Bereich V: Es ist $V(x) = V^V(x)$:

$$\Rightarrow \quad \tau = \sqrt{\frac{m\varepsilon^2}{V_0}} \int \frac{1}{\sqrt{(x-a)^2}} dx + C$$

Wegen $a - \varepsilon \leq x < a \Rightarrow x - a < 0$

$$\Rightarrow \tau = \sqrt{\frac{m\varepsilon^2}{V_0}} \int \frac{1}{a-x} dx + C$$

$$\tau = -\sqrt{\frac{m\varepsilon^2}{V_0}} \ln|x-a| + C'$$

$$\ln(a-x) = -\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau - C'')$$

Schließlich setzen wir $\tau_0^V = C''$ und finden:

$$x^V(\tau) = -\exp\left(-\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau - \tau_0^V)\right) + a \quad (89)$$

Erfreulicherweise erfüllt der Kink nach (85) und (89) die geforderten Randbedingungen $x(-\infty) = -a$ und $x(\infty) = a$. Im nächsten Schritt drücken wir $\tau_0^I, \tau_0^{II}, \tau_0^{IV}$ und τ_0^V durch τ_0 aus und bestimmen die Grenzen der verschiedenen Bereiche in Abhängigkeit von τ .

Wir starten in der Mitte. Im Bereich III gilt (87) solange, bis das Teilchen den unteren Rand $x = -a + 2\varepsilon$ oder den oberen Rand $x = a - 2\varepsilon$ erreicht hat. Das geschieht zu den Zeitpunkten $\tau = \tau_0 - \sqrt{\frac{m}{2V_0}}(a - 2\varepsilon)$ bzw. $\tau = \tau_0 + \sqrt{\frac{m}{2V_0}}(a - 2\varepsilon)$. Wir schreiben abkürzend:

$$x_c(\tau) = x^{III}(\tau) \quad \text{für } \tau_0 - \tau_1 \leq \tau \leq \tau_0 + \tau_1 \quad \text{mit } \tau_1 = \sqrt{\frac{m}{2V_0}}(a - 2\varepsilon) \quad (90)$$

Als nächstes kann τ_0^{II} durch τ_0 ausgedrückt werden, wenn man die Stetigkeitsbedingung $x^{II}(\tau_0 - \tau_1) = -a + 2\varepsilon$ ausnutzt:

$$\begin{aligned} \Rightarrow -a + 2\varepsilon + \sqrt{2}\varepsilon \cdot \sin\left(\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau_0 - \tau_1 - \tau_0^{II})\right) &= -a + 2\varepsilon \\ \sin\left(\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau_0 - \tau_1 - \tau_0^{II})\right) &= 0 \\ \tau_0^{II} &= \tau_0 - \tau_1 \end{aligned}$$

Wir arbeiten uns weiter vor, in dem wir den Zeitpunkt bestimmen, an dem $x^{II}(\tau) = -a + \varepsilon$ erreicht ist:

$$\begin{aligned} \Rightarrow -a + 2\varepsilon + \sqrt{2}\varepsilon \cdot \sin\left(\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^3}}(\tau - \tau_0 + \tau_1)\right) &= -a + \varepsilon \\ \sin\left(\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau - \tau_0 + \tau_1)\right) &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau - \tau_0 + \tau_1) &= -\frac{\pi}{4} \\ \tau &= \tau_0 - \tau_1 - \sqrt{\frac{m\varepsilon^2}{V_0}} \frac{\pi}{4} \end{aligned}$$

Für den Kink gilt also:

$$x_c(\tau) = x^{II}(\tau) \quad \text{für } \tau_0 - \tau_1 - \tau_2 \leq \tau \leq \tau_0 - \tau_1 \quad \text{mit } \tau_2 = \sqrt{\frac{m\varepsilon^2}{V_0}} \frac{\pi}{4} \quad (91)$$

Der nächste Schritt ist die Bestimmung von τ_0^I durch die Stetigkeitsbedingung $x^I(\tau_0 - \tau_1 - \tau_2) = -a + \varepsilon$:

$$\begin{aligned} \exp\left(\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau_0 - \tau_1 - \tau_2 - \tau_0^I)\right) - a &= -a + \varepsilon \\ \sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau_0 - \tau_1 - \tau_2 - \tau_0^I) &= \ln(\varepsilon) \\ \tau_0^I &= \tau_0 - \tau_1 - \tau_2 - \sqrt{\frac{m\varepsilon^2}{V_0}} \ln(\varepsilon) \end{aligned}$$

Dass im Logarithmus eine dimensionsbehaftete Größe steht, ist unproblematisch, weil der Term im Exponenten steht. Man kann nach (85) schreiben:

$$x^I(\tau) = \varepsilon \cdot \exp\left(\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau - \tau_0 + \tau_1 + \tau_2)\right) - a \quad (92)$$

Eine untere Grenze in der Dimension τ existiert für den Bereich I nicht, da sich die Lösung asymptotisch $-a$ nähert:

$$x_c(\tau) = x^{II}(\tau) \quad \text{für } -\infty < \tau \leq \tau_0 - \tau_1 - \tau_2 \quad (93)$$

Wir haben uns jetzt zum linken Rand des Kinks vorgearbeitet. Nun ist die rechte Seite an der Reihe. Wie bereits gesehen ist $x^{III}(\tau_0 + \tau_1) = a - 2\varepsilon$. Die Forderung der Stetigkeit $x^{IV}(\tau_0 + \tau_1) = a - 2\varepsilon$ erlaubt wiederum die Berechnung von τ_0^{IV} :

$$\begin{aligned} \Rightarrow a - 2\varepsilon + \sqrt{2}\varepsilon \cdot \sin\left(\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau_0 + \tau_1 - \tau_0^{IV})\right) &= a - 2\varepsilon \\ \sin\left(\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau_0 + \tau_1 - \tau_0^{IV})\right) &= 0 \\ \tau_0^{IV} &= \tau_0 + \tau_1 \end{aligned}$$

Der Zeitpunkt, an dem $x^{VI}(\tau) = a - 2\varepsilon$ gilt, ist:

$$\begin{aligned} \Rightarrow a - \varepsilon + \sqrt{2}\varepsilon \cdot \sin\left(\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau - \tau_0 - \tau_1)\right) &= a - \varepsilon \\ \sin\left(\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau - \tau_0 - \tau_1)\right) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau - \tau_0 - \tau_1) &= \frac{\pi}{4} \\ \tau &= \tau_0 + \tau_1 + \sqrt{\frac{m\varepsilon^2}{V_0}} \frac{\pi}{4} \end{aligned}$$

Mit der Definition von τ_2 lässt sich schreiben:

$$x_c(\tau) = x^{IV}(\tau) \quad \text{für } \tau_0 + \tau_1 \leq \tau \leq \tau_0 + \tau_1 + \tau_2 \quad (94)$$

Abschließend folgt die Bestimmung von τ_0^V aus der Stetigkeitsbedingung $x^V(\tau_0 + \tau_1 + \tau_2) = a - \varepsilon$:

$$\begin{aligned} \Rightarrow -\exp\left(-\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau_0 + \tau_1 + \tau_2 - \tau_0^V)\right) + a &= a - \varepsilon \\ -\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau_0 + \tau_1 + \tau_2 - \tau_0^V) &= \ln(\varepsilon) \\ \tau_0^V &= \tau_0 + \tau_1 + \tau_2 + \sqrt{\frac{m\varepsilon^2}{V_0}} \ln(\varepsilon) \end{aligned}$$

Analog zur Vorgehensweise im Bereich I schreiben wir (89) um:

$$x^V(\tau) = -\varepsilon \cdot \exp\left(-\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau - \tau_0 - \tau_1 - \tau_2)\right) + a \quad (95)$$

Außerdem haben wir die Grenzen des Bereichs V in der Dimension von τ gefunden:

$$x_c(\tau) = x^V(\tau) \quad \text{für } \tau_0 + \tau_1 + \tau_2 \leq \tau < \infty \quad (96)$$

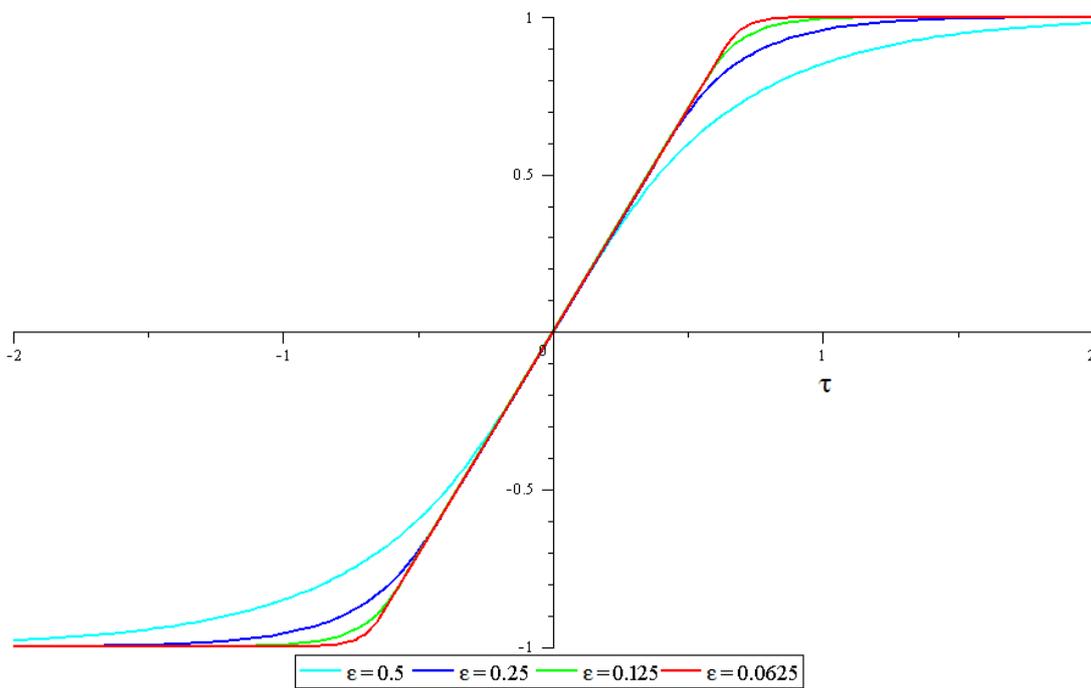
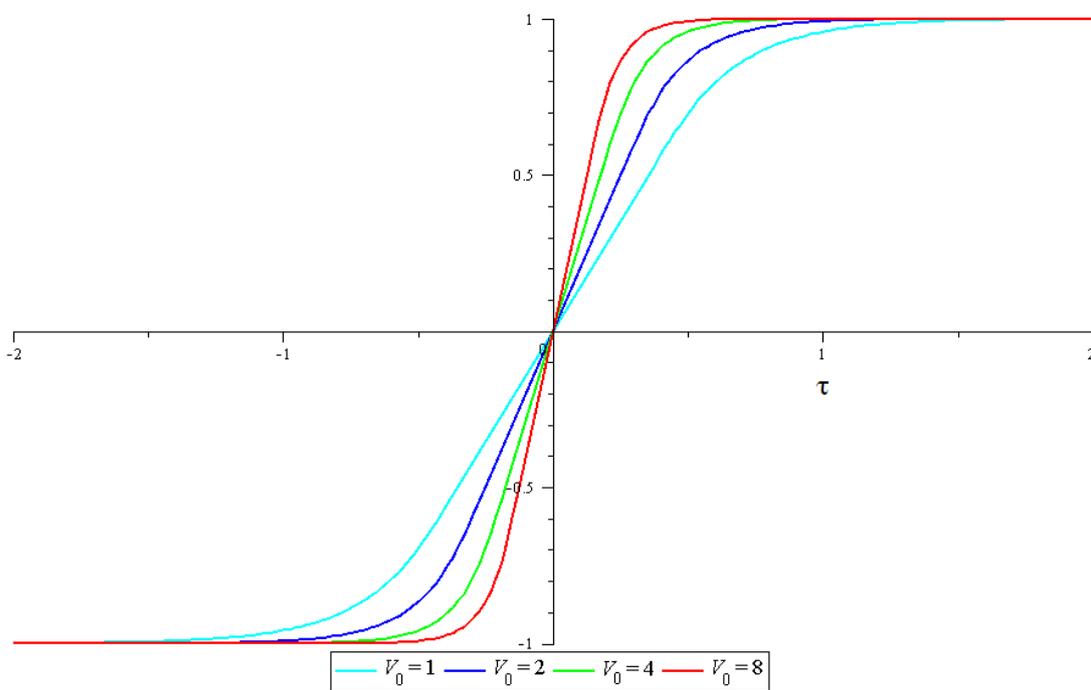
Die Kink-Lösung für das Potential ist nun vollständig berechnet worden. Die Lösung besitzt nur noch den freien Parameter τ_0 , der Ausdruck der Freiheit einer beliebigen zeitlichen Verschiebung ist, und ist ansonsten vollkommen durch die Potentialparameter V_0 , a , ε und durch die Masse m des Teilchens bestimmt.

$$x_c(\tau) = \begin{cases} \varepsilon \cdot \exp\left(\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau - \tau_0 + \tau_1 + \tau_2)\right) - a & -\infty < \tau \leq \tau_0 - \tau_1 - \tau_2 \\ \sqrt{2\varepsilon} \cdot \sin\left(\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau - \tau_0 + \tau_1)\right) - a + 2\varepsilon & \tau_0 - \tau_1 - \tau_2 < \tau \leq \tau_0 - \tau_1 \\ \sqrt{\frac{2V_0}{m}} \cdot (\tau - \tau_0) & \tau_0 - \tau_1 \leq \tau < \tau_0 + \tau_1 \\ \sqrt{2\varepsilon} \cdot \sin\left(\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau - \tau_0 - \tau_1)\right) + a - 2\varepsilon & \tau_0 + \tau_1 \leq \tau < \tau_0 + \tau_1 + \tau_2 \\ -\varepsilon \cdot \exp\left(-\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau - \tau_0 - \tau_1 - \tau_2)\right) + a & \tau_0 + \tau_1 + \tau_2 \leq \tau < \infty \end{cases} \quad (97)$$

$$\text{mit: } \tau_1 = \sqrt{\frac{m}{2V_0}}(a - 2\varepsilon) \quad \text{und} \quad \tau_2 = \sqrt{\frac{m\varepsilon^2}{V_0}} \frac{\pi}{4}$$

In Abbildung 13 ist die Kink-Lösung graphisch dargestellt. Das Teilchen verläuft von der rechten zur linken Mulde, wie wir gefordert hatten. Im ursprünglichen Rechteckpotential erwarten wir für die Kink-Lösung nach (8) eine konstante Geschwindigkeit zwischen den Mulden. Im oberen Bild erkennt man, dass sich dieses Verhalten reproduzieren lässt, wenn ε klein wird. Das lässt sich auch an der Formel (97) erkennen. Da $\tau_2 \sim \varepsilon$ ist, werden die Bereiche II und IV immer schmaler, in denen die gleichförmige Bewegung nicht eingehalten wird. Außerdem geschieht die asymptotische Annäherung an die Mulden in diesem Fall rascher. Für größere Werte von ε ist der Kink am Rand der Potentialbarriere gekrümmt und das Grenzverhalten verlangsamt.

Im unteren Bild ist die Kink-Lösung für unterschiedliche Höhen der Potentialbarriere V_0 gezeichnet. Je höher V_0 ist, desto größer ist die Geschwindigkeit zwischen den Mulden, so dass das Teilchen die Barriere schneller überbrückt. Für sehr große V_0 springt das Teilchen nahezu instantan von einer in die andere Mulde. Die Trajektorie wird zu einem Knick, was zu der Bezeichnung Kink führte.

(a) Kink bei Verkleinerung von ϵ ($V_0 = 1$)(b) Kink bei Vergrößerung von V_0 ($\epsilon = 0,25$)Abbildung 13: Kinklösung ($m = 1$, $a = 1$)

Nun haben wir alles zusammen, um den Vorfaktor K zu berechnen. Eine Voraussetzung der Näherungsformel ist, dass der Nulldurchgang von $x_c(\tau)$ zur Zeit $\tau = 0$ geschieht, so dass im Folgenden $\tau_0 = 0$ ist. Nach (77) benötigen wir die Ableitung des Kink an den Grenzen $\tau \rightarrow \pm\infty$. Wählen wir die obere Grenze, finden wir:

$$\begin{aligned}\dot{x}_c &= -\varepsilon \left(-\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}\right) \exp\left(-\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau - \tau_1 - \tau_2)\right) \\ \dot{x}_c &= \sqrt{\frac{V_0}{m}} \exp\left(\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau_1 + \tau_2)\right) \exp\left(-\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}\tau\right)\end{aligned}$$

Nach (73) ist

$$\omega = \sqrt{\frac{1}{m} \frac{d^2}{dx^2} V^V(x)|_{x=a}} = \sqrt{\frac{1}{m} \frac{d^2}{dx^2} \frac{V_0}{2\varepsilon^2} (x-a)^2|_{x=a}} = \sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}, \quad (98)$$

so dass sich $\dot{x}_c(\tau)$ im betrachteten Grenzfall wie nach (77) gefordert folgendermaßen schreiben lässt:

$$\dot{x}_c(\tau) = A \cdot e^{-\omega\tau} \quad \text{mit: } A = \sqrt{\frac{V_0}{m}} \cdot \exp\left(\sqrt{\frac{V_0}{m\varepsilon^2}}(\tau_1 + \tau_2)\right) \quad (99)$$

Mit Hilfe der Definitionen von τ_1 und τ_2 (siehe (97)) ergibt sich:

$$A = \sqrt{\frac{V_0}{m}} \cdot \exp\left(\frac{a-2\varepsilon}{\sqrt{2}\varepsilon} + \frac{\pi}{4}\right) \quad (100)$$

Nach (78) können wir nun den Vorfaktor berechnen:

$$K = \sqrt{\frac{m}{\pi\hbar}} \left(\frac{V_0}{m\varepsilon^2}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{V_0}{m}} e^{\frac{\pi}{4}} e^{\frac{a-2\varepsilon}{\sqrt{2}\varepsilon}}$$

$$\boxed{K = \left(\frac{V_0^3}{\pi^2\hbar^2 m\varepsilon^2}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{\pi}{4}} e^{\frac{a}{\sqrt{2}\varepsilon} - \sqrt{2}}} \quad (101)$$

Damit ist der Vorfaktor für die Approximation gefunden. Der Vorfaktor für das rechteckförmige Potential sollte sich im Grenzwert $\varepsilon \rightarrow 0$ ergeben. ε taucht im Nenner des vorderen Terms und im Exponenten der Exponentialfunktion auf. Für den Grenzwert divergiert der Vorfaktor:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} K = \infty \quad (102)$$

Demnach müssten wir eine unendlich große Energieaufspaltung ΔE erwarten. Dieses Ergebnis entspricht nicht den exakten Ergebnissen aus Kapitel 2.

3.2.3 Was läuft schief?

Fragen wir uns abschließend, woran es liegt, dass wir keinen korrekten Wert für K erhalten haben. Dazu betrachten wir die Näherungsformel (50), die wir aus der exakten Lösung im semiklassischen Grenzfall hergeleitet haben. Der Vorfaktor ist dort

$$\tilde{K} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^3} \sqrt{\frac{8}{V_0 m}} = \tilde{K}(b)$$

und somit explizit von b abhängig. b ist die Breite der Mulden des Rechteckpotentials. Das K , das man aus der Pfadintegralmethode erhält, hängt hingegen nur von dem Kink ab. Der Kink ist ein Weg zwischen den Mulden von $x = -a$ nach $x = a$. Dort spielt der Parameter b überhaupt keine Rolle.

Grundlegend müssen wir bei der Nachbetrachtung der Näherungsmethode feststellen, dass sie überhaupt keinen Unterschied zwischen verschiedenen Potentialen macht, solange nur die Barriere zwischen den Mulden identisch ist. Implizit geht die Methode sogar davon aus, dass das Krümmungsverhalten abseits der Mulden beibehalten wird. Schauen wir uns dazu die Abbildung 14 an. Dort ist das rechteckförmige Po-

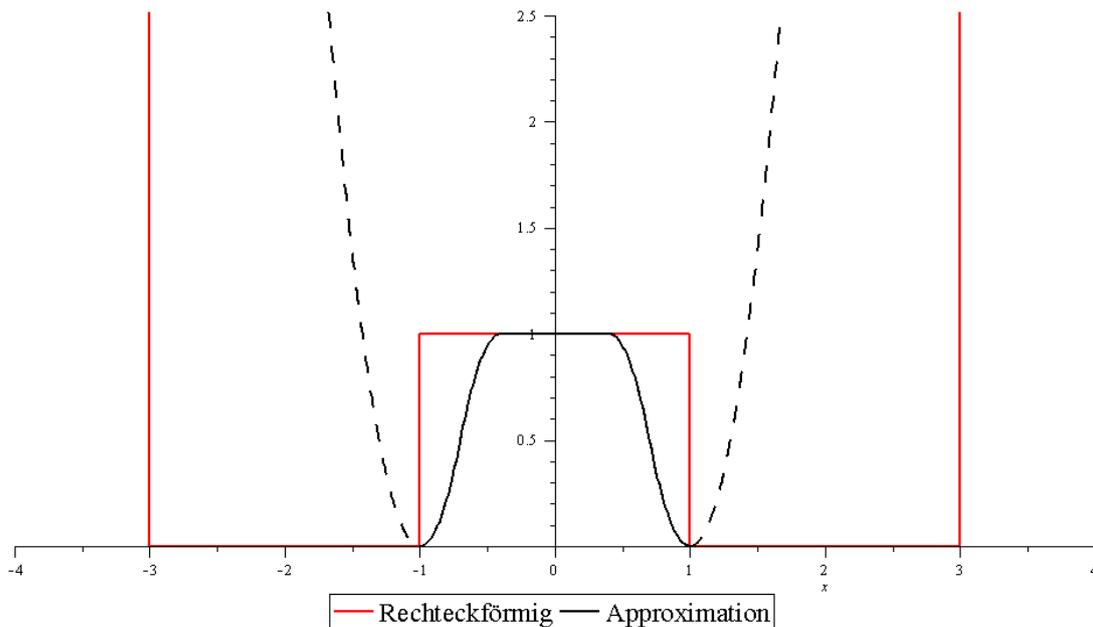


Abbildung 14: Ursprüngliches Potential und die Approximation mit hypothetischen Verlauf außerhalb der Barriere gestrichelt ($a = 1$, $b = 2$, $V_0 = 1$ und $\varepsilon = 0, 3$)

tential zusammen mit der quadratischen Approximation eingezeichnet. Zusätzlich ist diesmal mit der gestrichelten Linie der Verlauf der Approximation gekennzeichnet, den die Näherungsmethode erwartet. Sie geht davon aus, dass sich das Potential für $x < -a$ und $x > a$ parabelförmig fortsetzt. Im Bereich der Mulde fänden wir dann das Potential des harmonischen Oszillators.

Man darf an dieser Stelle allerdings nicht davon ausgehen, dass der Vorfaktor aus

(101) für die Approximation im Limes $\varepsilon \rightarrow \infty$ die korrekte Lösung ist. Für die Näherungsformel ist entscheidend, dass sich die ersten beiden Zustände des Doppelmuldenpotentials energetisch unterhalb der Barriere befinden. Da wir wissen, dass ihre Energien E_0 und E_1 ungefähr so groß sind, wie die des Grundzustands der einzelnen Mulde, welche für die Approximation nichts anderes als die Grundzustandsenergie des harmonischen Oszillators ist, können wir sie mit

$$E_{0/1} \approx \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (103)$$

abschätzen. Für $\varepsilon \ll 1$ wird nach (98) ω sehr groß, so dass E_0 und E_1 die Potentialbarriere energetisch übersteigen werden. Die Näherungsmethode ist dann nicht mehr anwendbar.

4 Zusammenfassung

In dieser Bachelorarbeit ist die Energieaufspaltung der untersten beiden Zustände eines symmetrischen Doppelmuldenpotentials die zentrale Größe. Sie wurde am Beispiel eines rechteckförmigen Doppelmuldenpotentials zunächst exakt mit Hilfe der stationären Schrödingergleichung berechnet. Anschließend wurde versucht, die Energieaufspaltung mit einer Näherungsmethode, die auf dem euklidischen Pfadintegral beruht, zu berechnen.

Die Resultate der exakten Rechnung entsprechen den grundlegenden Eigenschaften symmetrischer Doppelmuldenpotentiale (siehe Kapitel 1.1). Die Energieaufspaltung ΔE ist klein gegenüber der Eigenenergien E_0 und E_1 und sinkt exponentiell, wenn die Höhe der Potentialbarriere zwischen den Mulden größer wird. Mit Hilfe einer Grenzwertbetrachtung konnte aus der exakten Lösung für die Eigenenergien die Näherungsformel (50) für die Energieaufspaltung gefunden werden. Der Grenzwert bestand in der Bedingung, dass die euklidische Wirkung der Kink-Lösung groß wird, was nach [3] der semiklassische Bereich ist, in dem gute Ergebnisse von der später durchgeführten Pfadintegralmethode erwartet wurden. Die gefundene Näherungsformel lieferte einen führenden exponentiellen Term mit dem Negativen der euklidischen Wirkung des Kinks im Exponenten, was dem Gamow-Faktor für einen Tunnelprozess eines Teilchens von der linken in die rechte Mulde entspricht, und einen Vorfaktor \tilde{K} , in dem die Grundzustandsenergie des unendlich tiefen Potentialtopfs auftauchte. Die Frage an dieser Stelle war, ob man mit der Pfadintegralmethode dieses Ergebnis reproduzieren kann.

Davor wurde aber noch ein weiterer Grenzfall betrachtet, in dem als Potentialbarriere ein δ -Peak benutzt wurde. Die Symmetrie des Rechteckpotentials wurde so nicht gebrochen, so dass bei der Berechnung der Wellenfunktionen und Eigenenergien weiterhin zwischen symmetrischen und antisymmetrischen Zuständen unterschieden werden konnte. Die symmetrischen Wellenfunktionen zeigen am Ort des δ -Peaks einen Knick. Die antisymmetrischen Wellenfunktionen haben die selbe Form wie die antisymmetrischen Zustände in einem unendlich tiefen Potentialtopf. Ihre Bestimmungsgleichungen für die erlaubten k (63) und (67) konnten verifiziert werden, indem die Bestimmungsgleichungen (36) und (43) für die Zustände im Rechteckpotential in dem Grenzfall (53) ausgewertet wurden.

Schließlich wurde versucht, die Näherungsmethode für die Energieaufspaltung auf das rechteckförmige Doppelmuldenpotential anzuwenden. Bei dem zu lösenden Pfadintegral beschränkt man sich auf den Kink, dessen euklidische Wirkung den Hauptbeitrag liefert, und einer Variation von ihm bis zur quadratischen Ordnung. Ersteres führte auf den exponentiellen Term, dessen Auftreten nach dem semiklassischen Grenzwert der exakten Lösung erwartet wurde. Die Berechnung der Beiträge der Fluktuationen wurde nach [1] ausgeführt, in der Hoffnung, auch den Vorfaktor \tilde{K} reproduzieren zu können. An dieser Stelle hat die Näherungsmethode leider versagt. Es konnte zwar für eine quadratische Approximation des rechteckförmigen Potentials ein Vorfaktor K berechnet werden, der jedoch in dem Grenzwert, in dem sich die Approximation der rechteckigen Form des ursprünglichen Potentials annähert,

divergiert. Die Gründe hierfür konnten darin gefunden werden, dass die Näherungsmethode an dieser Stelle nicht zwischen Potentialen unterscheidet, die zwar zwischen den Mulden identisch sind, aber außerhalb dieses Bereichs völlig unterschiedlich verlaufen.

Als Ergebnis der Bachelorarbeit kann festgehalten werden, dass die Pfadintegralmethode in erster Näherung den führenden exponentiellen Term liefert, was schon eine sehr gute Näherung für die Energieaufspaltung ist, aber bei der Berechnung des Vorfaktors K im vorliegenden Spezialfall eines rechteckförmigen Doppelmuldenpotentials scheitert und zu keiner Verbesserung der Näherungsformel führt.

Literatur

- [1] Coleman, S.: 1985, *Aspects of Symmetry*, Cambridge Univ. Pr. Chapter 7.
- [2] Mariño, M.: n.d., *Instanton and large N An introduction to non-perturbative methods in QFT*, <http://laces.web.cern.ch/Laces/LACES10/notes/instlargen.pdf>. Lecture notes.
- [3] Münster, G.: 2010, *Quantentheorie*, de Gruyter, Berlin/New York.
- [4] Rattazzi, R.: 2009, *The Path Integral approach to Quantum Mechanics*, <http://itp.epfl.ch/webdav/site/itp/users/174685/private/RevisedLectureNotesV2.pdf>. Lecture notes for Quantum Mechanics IV.
- [5] Shankar, R.: 2007, *Principles of Quantum Mechanics*, second edn, Springer. Chapter 21.

Für Rechnungen und zum Erstellen der Graphiken wurde folgendes Programm verwendet:

- Waterloo Maple Inc.: *Maple*, Version 14.0

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst habe, und dass ich keine anderen Quellen und Hilfsmittel als die angegebenen benutzt habe 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.

Münster, den 17. Mai 2012