



VERGLEICH VON VARIATIONSVERFAHREN
UND EXAKTEN ERGEBNISSEN FÜR DAS
RAZAVY-POTENZIAL

COMPARISON OF VARIATIONAL METHODS AND EXACT
RESULTS FOR THE RAZAVY POTENTIAL

Bachelorarbeit im Studiengang 'Bachelor of Science'
im Fach Physik

eingereicht von
Stephan Bröker

Juli 2016

Betreut von

Prof. Dr. G. Münster und Prof. Dr. S. Linz



Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	2
2.1	Einheitensystem	2
2.2	Variationsverfahren	2
2.3	Auswahl der Testfunktionen	2
3	Eigenschaften des Potentials	3
4	Testfunktion aus zwei verschobenen Gaußfunktionen	6
4.1	Bestimmung der Energie	6
4.1.1	Berechnung des Nenners	6
4.1.2	Berechnung des Impulsterms	6
4.1.3	Berechnung des Potentialterms	7
4.2	Minimierung der Energie	9
4.3	Vergleich mit den exakten Energien	10
4.4	Vergleich mit den exakten Wellenfunktionen	15
4.4.1	Vergleich der Wellenfunktionen des Grundzustandes	15
4.4.2	Vergleich der Wellenfunktionen des ersten angeregten Zustandes	18
4.5	Vergleich mit dem harmonischen Oszillator	20
5	Testfunktion aus Produkt von Polynom und Gaußfunktion	24
5.1	Bestimmung der Energie	24
5.1.1	Berechnung des Nenners	24
5.1.2	Berechnung des Impulsterms	25
5.1.3	Berechnung des Potentialterms	26
5.1.4	Energie des Grundzustandes	29
5.1.5	Energie des ersten angeregten Zustandes	31
5.2	Minimierung der Energie	32
5.3	Vergleich mit den exakten Energien	33
5.4	Vergleich mit den exakten Wellenfunktionen	34
6	Vergleich der Testfunktionen	37
7	Zusammenfassung und Fazit	39
A	Tabellarische Übersicht der Energien	42
A.1	Energiewerte für $n=1$	42
A.2	Energiewerte für $n=2$	43
A.3	Energiewerte für $n=3$	44
A.4	Energiewerte für $n=4$	45

1 Einleitung

In der Quantenmechanik sind Systeme, deren zugehörige Potentiale eine Doppelmuldengestalt haben, sehr weit verbreitet. Solche Potentiale dienen der Beschreibung von Systemen mit zwei versetzten attraktiven Kräften oder Systemen mit einer attraktiven Kraft großer Reichweite und einer abstoßenden Kraft kurzer Reichweite. Reale Anwendungen von Doppelmuldenpotentialen sind zum Beispiel die Bestimmung der Schwingungsspektren von Ammoniak [1] oder die Untersuchung von Tunnelprozessen beispielsweise von Bose-Einstein Kondensaten [2].

In der Regel sind reale Potentiale nicht analytisch lösbar, nur ein kleiner Teil der Doppelmuldenpotentiale kann analytisch exakt berechnet werden. Neben den exakt lösbaren und den nicht analytisch lösbaren quantenmechanischen Potentialen gibt es noch die Klasse der quasi-exakt lösbaren Potentiale. Bei diesen Potentialen kann eine bestimmte Anzahl an Wellenfunktionen und Eigenenergien analytisch exakt bestimmt werden, zu diesen gehört das Razavy-Potential. [3]

Um auch über die Gestalt der Wellenfunktion und die Eigenenergie von nicht analytisch lösbaren quantenmechanischen Systemen Aussagen machen zu können, werden Näherungsverfahren benötigt.

In dieser Arbeit soll die Qualität der Näherung eines Doppelmuldenpotentials durch das Variationsverfahren untersucht werden. Das von Razavy in seiner Arbeit [3] vorgestellte Potential hat eine solche Doppelmuldengestalt und ist quasi-exakt lösbar. Konkret bedeutet das für diese Arbeit, dass die untersuchten Zustände analytisch exakt lösbar sind. Damit ist das Potential sehr gut geeignet um die Qualität der Näherung durch das Variationsverfahren zu beurteilen.

Das Variationsverfahren liefert Obergrenzen der Eigenenergien eines Systems und eine Näherung für die Wellenfunktion. So kann durch das Variationsverfahren nicht nur eine Aussage über die Energie gemacht werden, sondern auch eine Abschätzung der Testwellenfunktion geschehen. Je nachdem, wie gut die Energieobergrenze mit der Eigenenergie übereinstimmt, stimmen auch die Wellenfunktionen miteinander überein.

Zu Beginn der Arbeit wird ein Ansatz für eine Wellenfunktion gewählt und gemäß dem Variationsverfahren wird eine Energieobergrenze für den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand bestimmt. Die gefundenen Energieobergrenzen und Wellenfunktionen werden mit den exakten Ergebnissen verglichen. Außerdem wird untersucht, wie stark sich eine Näherung des Potentials auf die Energie und auf die Wellenfunktionen auswirkt.

Mit Hilfe der Ergebnisse der ersten Testfunktion und deren Eigenschaften wird eine zweite Testfunktion gewählt. Auch deren Energien und Wellenfunktionen werden mit den exakten Ergebnissen und den Ergebnissen der ersten Testfunktion verglichen.

Letztendlich können die exakten Eigenenergien und Wellenfunktionen ausführlich mit den Ergebnissen des Variationsverfahrens verglichen werden und auch ein Schluss über die Qualität des Variationsverfahrens für Doppelmuldenpotentiale gemacht werden.

2 Grundlagen

2.1 Einheitensystem

Alle verwendeten Einheiten werden so gewählt, dass $\hbar = 1$ gilt.

2.2 Variationsverfahren

Da das Variationsverfahren, welches auch Variationsmethode genannt wird, untersucht werden soll, wird dieses kurz erklärt.

Beim Variationsverfahren werden für ein quantenmechanisches Potential obere Schranken der diskreten Eigenenergien gesucht. Es könnten auch obere Schranken für andere quantenmechanische Observablen, deren Spektrum diskret ist, bestimmt werden.

Zunächst wird eine von Parametern abhängige Testfunktion $\Psi(\alpha_1, \alpha_2, \alpha \dots)$ gewählt. Dann wird die Energie dieser Testfunktion bestimmt gemäß

$$E(\alpha_1, \alpha \dots) = \frac{\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (2.1)$$

Diese Energie, abhängig von den Parametern α_i gilt es nun zu minimieren um eine obere Schranke des Energieeigenwertes zu finden. Dass es sich um eine obere Schranke des Grundzustandes handelt, lässt sich mit der Ungleichung [4, S.235]

$$\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle = \sum_n \langle \Psi | n \rangle E_n \langle n | \Psi \rangle \geq E_0 \sum_n \langle \Psi | n \rangle \langle n | \Psi \rangle = E_0 ||\Psi||^2 \quad (2.2)$$

zeigen. Teilt man den gefundenen Ausdruck noch durch die Norm, zeigt sich, dass der Ausdruck eine obere Schranke der Grundzustandsenergie definiert. Durch geschickte Wahl der Testfunktion kann man so gute Einschätzungen der Eigenenergie erhalten.

Um nun eine obere Schranke der Energie des ersten angeregten Zustandes zu erhalten, wählt man als Ausgangsfunktion eine Testfunktion Ψ_{\perp} die senkrecht auf der Grundzustandsfunktion Ψ_0 liegt, sodass gilt $\langle \Psi_0 | \Psi_{\perp} \rangle = 0$. Damit fällt in der Summe der Summand $n=0$ raus und es findet sich die Ungleichung

$$E_1 \leq \frac{\langle \Psi_{\perp} | \mathcal{H} | \Psi_{\perp} \rangle}{\langle \Psi_{\perp} | \Psi_{\perp} \rangle}. \quad (2.3)$$

Da die Grundzustandswellenfunktion eines symmetrischen Potentials immer gerade ist (Kapitel 2.3), genügen alle ungeraden Funktionen dieser Bedingung.

Falls sich im Vergleich mit der exakten Eigenenergie nun zeigt, dass die Energiewerte äußerst gut übereinstimmen, kann man Rückschlüsse auf die Gestalt der Wellenfunktion ziehen. Unbekannte oder äußerst kompliziert strukturierte Wellenfunktionen lassen sich so bis zu einem gewissen Grad annähern.

2.3 Auswahl der Testfunktionen

Da Paritätsoperator und Hamiltonoperator für symmetrische Potentiale vertauschen, haben diese für das Razavy-Potential gemeinsame Eigenvektoren, somit sind die Wellenfunktionen

entweder gerade oder ungerade. Und da für den n -ten Zustand jeweils $n - 1$ Knotenpunkte (Schnittpunkte der Wellenfunktion mit der x -Achse) existieren[5], ist die Grundzustandswellenfunktion gerade und die Wellenfunktion des ersten angeregten Zustandes ungerade. Dies ist das wichtigste Kriterium für die Wellenfunktionen.

Die Auswahl der Testfunktionen geschieht ansonsten nach naiven Kriterien. Bei einem Potential mit Doppelmuldengestalt wird erwartet, dass sich die Wellenfunktion um die Minima zentriert. Dies soll mit einer Linearkombination zweier verschobener Gaußkurven möglichst gut realisiert werden. Um die Testfunktion für den ersten angeregten Zustand zu erhalten, spiegelt man eine der Gaußkurven an der x -Achse. Damit ist die Testfunktion für den ersten angeregten Zustand ungerade und entspricht den Kriterien.

Zur Auswahl der zweiten Testfunktion werden sowohl diese Kriterien, als auch die Ergebnisse der Berechnung der ersten Testfunktion genutzt. So wird als zweite Testfunktion ein Produkt aus Polynom und Gaußkurve gewählt.

3 Eigenschaften des Potentials

Zu Beginn der Berechnungen soll das Razavy-Potential auf eine einfachere Form gebracht werden, dazu werden einige Umskalierungen vorgenommen. Diese orientieren sich stark an der Arbeit von Poel [6]. Ebenso werden zwei Abbildungen des Razavy-Potentials gezeigt, sodass der Verlauf in Abhängigkeit der Parameter erkannt werden kann.

Das von Razavy in seiner Arbeit [3] vorgestellte Doppelmuldenpotential hat zunächst die Form

$$V(x) = \frac{\beta^2}{2m} \left(\frac{1}{8}\xi^2 \cosh(4\beta x) - (n+1)\xi \cosh(2\beta x) - \frac{1}{8}\xi^2 \right) \quad (3.1)$$

Um die zukünftigen Rechnungen übersichtlicher zu gestalten, werden einige Umskalierungen und Definitionen eingeführt. Dafür werde zunächst die zugehörige eindimensionale Schrödingergleichung

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \right) \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (3.2)$$

aufgestellt. Durch Multiplikation der Gleichung mit $\frac{2m}{\beta^2}$ und einführen der Größe $\hat{x} = \beta x$ vereinfacht sich die Gleichung zu

$$\left(-\frac{d^2}{d\hat{x}^2} + \frac{1}{8}\xi^2 \cosh(4\hat{x}) - (n+1)\xi \cosh(2\hat{x}) - \frac{1}{8}\xi^2 \right) \Psi(\hat{x}) = \frac{2m}{\beta^2} E\Psi(\hat{x}). \quad (3.3)$$

Im Folgenden wird \hat{x} als x bezeichnet, die neue Größe x ist dimensionslos. Die Substitutionen $\frac{2m}{\beta^2} E = \epsilon$ und $s = \frac{\xi}{2(n+1)}$ liefern

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + (n+1)^2 \left(\frac{s^2}{2} \cosh(4x) - 2s \cosh(2x) - \frac{s^2}{2} \right) \right] \Psi(x) = \epsilon\Psi(x). \quad (3.4)$$

Nun wird das Potential noch so verschoben, dass die Funktionswerte der Minima bei 0 liegen. Dazu wird zum Potential noch $(n + 1)^2(s^2 + 1)$ addiert [6]. Damit ergibt sich für die Schrödingergleichung

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + (n + 1)^2 \left(\frac{s^2}{2} (\cosh^2(2x) + \sinh^2(2x)) - 2s \cosh(2x) + \frac{s^2}{2} + 1 \right) \right] \Psi(x) = \epsilon \Psi(x). \quad (3.5)$$

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + (n + 1)^2 \left(\frac{s^2}{2} (2 \cosh^2(2x) - 1) - 2s \cosh(2x) + \frac{s^2}{2} + 1 \right) \right] \Psi(x) = \epsilon \Psi(x). \quad (3.6)$$

Mit der zweiten binomischen Formel vereinfacht sich die Gleichung zu

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + (n + 1)^2 (s \cosh(2x) - 1)^2 \right] \Psi(x) = \epsilon \Psi(x) \quad (3.7)$$

mit dem Potential

$$v_{n,s}(x) = (n + 1)^2 (s \cosh(2x) - 1)^2. \quad (3.8)$$

Es wird mit der Schrödingergleichung in dieser Form gearbeitet.

Das Potential $v_{n,s}(x)$ hängt nun von den Parametern s und n ab, die Gestalt des Potentials für verschiedene Parameter ist in den Abbildungen 1 und 2 dargestellt.

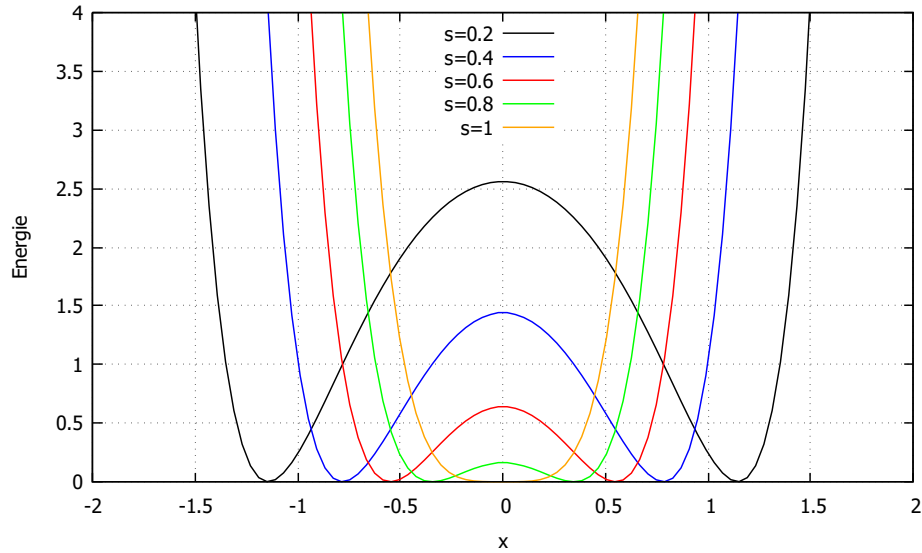


Abbildung 1: Razavy-Potential $v_{s,n}(x)$ für $n = 1$ und verschiedene Werte von s , sowohl der Abstand zwischen den Mulden als auch die Höhe des Potentialbergs bei $x = 0$ steigen für kleiner werdende Werte von s

Die Abbildung 1, in der der Parameter s variiert wird, zeigt, dass die Ausprägung der Doppelmuldengestalt mit kleiner werdendem s steigt. Für $s = 1$ gibt es keine Doppelmulde sondern nur eine einfache Mulde. In dieser Arbeit wird deshalb nur der Fall $0 < s < 1$ behandelt.

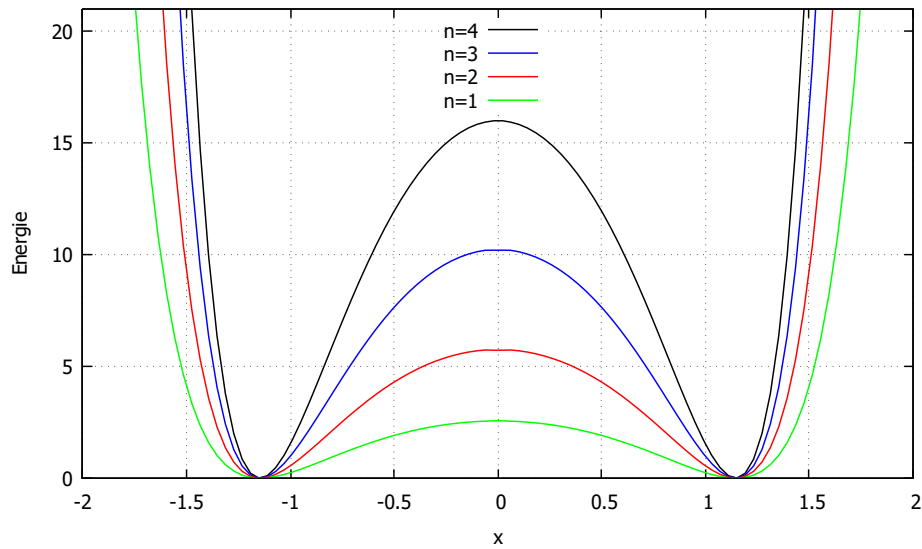


Abbildung 2: Razavy-Potential $v_{s,n}(x)$ für $s = 0,2$ und verschiedene Werte von n , die Lage der Minima hängt nicht von n ab, das Potential skaliert mit $(n + 1)^2$

Der Abbildung 2, in der das Razavy-Potential für verschiedene Werte von n dargestellt ist, kann man entnehmen, dass der Parameter n nur skalierende Eigenschaften hat. Das Potential skaliert mit dem Faktor $(n + 1)^2$.

4 Testfunktion aus zwei verschobenen Gaußfunktionen

Mit dem Variationsverfahren wird nun eine Energieobergrenze der untersten beiden Zustände für das beschriebene Potential gesucht. Die erste Testfunktion ist dabei eine Linearkombination aus zwei verschobenen Gaußfunktionen. Dabei werden sowohl die geraden als auch die ungeraden Testfunktionen untersucht. Gesucht ist also zunächst:

$$E_{s,n}(a, b) = \frac{\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (4.1)$$

mit

$$\Psi = e^{-a(x-b)^2} \pm e^{-a(x+b)^2} \quad \text{und} \quad (4.2)$$

$$\mathcal{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + (n+1)^2 [s \cosh(2x) - 1]^2 \quad (4.3)$$

Dabei soll mit der geraden Funktion (+) die Energie des Grundzustandes bestimmt werden und mit der ungeraden Funktion (-) die Energie des ersten angeregten Zustandes bestimmt werden. Die Bestimmung der Energie geschieht für beide Testfunktionen parallel.

4.1 Bestimmung der Energie

Aus Gründen der Übersichtlichkeit sollen Zähler und Nenner getrennt berechnet werden.

4.1.1 Berechnung des Nenners

Für den Nenner des Quotienten findet sich

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx \quad (4.4)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(e^{-a(x-b)^2} \pm e^{-a(x+b)^2} \right)^2 dx \quad (4.5)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(e^{-a(x-b)^2} \right)^2 + \left(e^{-a(x+b)^2} \right)^2 \pm 2e^{-2a(x^2+b^2)} dx \quad (4.6)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2ax^2} \left(1 + 1 \pm 2e^{-2ab^2} \right) dx \quad (4.7)$$

$$= \left(1 \pm e^{-2ab^2} \right) \sqrt{\frac{2\pi}{a}}. \quad (4.8)$$

4.1.2 Berechnung des Impulsterms

Auch die Berechnung des Zählers wird in zwei Teile aufgeteilt, die Berechnung des Impulsterms und die des Potentialterms.

$$\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle \quad (4.9)$$

$$= \underbrace{\langle \Psi | -\frac{d^2}{dx^2} | \Psi \rangle}_{\text{Impulsterm}} + \underbrace{\langle \Psi | v(x) | \Psi \rangle}_{\text{Potentialterm}} \quad (4.10)$$

Zunächst wird nur der Impulsterm berechnet. Für diesen ergibt sich

$$\langle \Psi | -\frac{d^2}{dx^2} | \Psi \rangle \quad (4.11)$$

$$= -\int_{-\infty}^{+\infty} \left(e^{-a(x-b)^2} \pm e^{-a(x+b)^2} \right) \left(\frac{d^2}{dx^2} \right) \left(e^{-a(x-b)^2} \pm e^{-a(x+b)^2} \right) dx \quad (\text{part.Integration}) \quad (4.12)$$

$$= +\int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{d}{dx} \left(e^{-a(x-b)^2} \pm e^{-a(x+b)^2} \right) \right]^2 dx \quad (4.13)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-2a(x-b)e^{-a(x-b)^2} \pm (-2a)(x+b)e^{-a(x+b)^2} \right)^2 dx. \quad (4.14)$$

Nach dem Ausmultiplizieren liefert die Substitution $x' = x \pm b$ im linken Summanden für den Impulsterm

$$= 4a^2 \int_{-\infty}^{+\infty} 2x^2 e^{-2ax^2} \pm 2(x^2 - b^2)e^{-2a(x^2+b^2)} dx \quad (4.15)$$

$$= 4a^2 \sqrt{\frac{\pi}{(2a)^3}} \pm 8a^2 e^{-2ab^2} \int_{-\infty}^{+\infty} (x^2 - b^2)e^{-2ax^2} dx \quad (4.16)$$

$$= \sqrt{2a\pi} \pm 8a^2 e^{-2ab^2} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2a^3}} - b^2 \sqrt{\frac{\pi}{2a}} \right) \quad (4.17)$$

$$= \sqrt{2a\pi} \pm \sqrt{2}\sqrt{\pi a} e^{-2ab^2} - 4\sqrt{2}ab^2 \sqrt{a\pi} e^{-2ab^2} \quad (4.18)$$

$$= \sqrt{2a\pi} (1 \pm e^{-2ab^2} (1 - 4ab^2)) \quad (4.19)$$

$$= \sqrt{\frac{2\pi}{a}} a (1 \pm e^{-2ab^2}) \mp \sqrt{2a\pi} e^{-2ab^2} 4ab^2 \quad (4.20)$$

$$= a \langle \Psi | \Psi \rangle \mp \sqrt{2a\pi} e^{-2ab^2} 4ab^2. \quad (4.21)$$

Die Darstellung von Teilen des Zählers als Vielfaches des Nenners erweist sich bei der späteren Division als nützlich.

4.1.3 Berechnung des Potentialterms

Der Potentialterm enthält die cosh-Funktion, welche sich als Summe zweier Exponentialfunktionen darstellen lässt. Daher erweist es sich als hilfreich, zunächst den Hilfstern $\langle \Psi | e^{mx} | \Psi \rangle$

zu berechnen.

$$\langle \Psi | e^{mx} | \Psi \rangle \quad (4.22)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(e^{-a(x-b)^2} \pm e^{-a(x+b)^2} \right)^2 e^{mx} dx \quad (4.23)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left((e^{-a(x-b)^2})^2 + (e^{-a(x+b)^2})^2 \pm 2e^{-2a(x^2+b^2)} \right) e^{mx} dx \quad \text{Subst. } x' = x \pm b \quad (4.24)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2ax^2+mx} \left(e^{mb} + e^{-mb} \pm 2e^{-2ab^2} \right) dx \quad (4.25)$$

$$= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2a(x^2-\frac{mx}{2a})} \left(\cosh(mb) \pm e^{-2ab^2} \right) dx \quad (4.26)$$

$$= 2 \left(\cosh(mb) \pm e^{-2ab^2} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2a(x^2-\frac{mx}{2a})} dx \quad (4.27)$$

$$= 2 \left(\cosh(mb) \pm e^{-2ab^2} \right) e^{\frac{m^2}{8a}} \sqrt{\frac{\pi}{2a}} \quad (4.28)$$

Es zeigt sich die Eigenschaft

$$\langle \Psi | e^{mx} | \Psi \rangle = \langle \Psi | e^{-mx} | \Psi \rangle. \quad (4.29)$$

Nun wird der eigentliche Potentialterm bestimmt, es ergibt sich

$$\langle \Psi | (n+1)^2 [s \cosh(2x) - 1]^2 | \Psi \rangle \quad (4.30)$$

$$= (n+1)^2 \langle \Psi | \left[\frac{s}{2} (e^{2x} + e^{-2x}) - 1 \right]^2 | \Psi \rangle \quad (4.31)$$

$$= (n+1)^2 \langle \Psi | \left[\frac{s^2}{4} (e^{4x} + e^{-4x} + 2) - s(e^{2x} + e^{-2x}) + 1 \right] | \Psi \rangle \quad (4.32)$$

$$= (n+1)^2 \left[\langle \Psi | \left[\frac{s^2}{2} e^{4x} - 2se^{2x} \right] | \Psi \rangle + \left(\frac{s^2}{2} + 1 \right) \langle \Psi | \Psi \rangle \right] \quad (4.33)$$

$$= (n+1)^2 \left[\sqrt{\frac{\pi}{2a}} \left[s^2 \left(\cosh(4b) \pm e^{-2ab^2} \right) e^{\frac{2}{a}} - 4s \left(\cosh(2b) \pm e^{-2ab^2} \right) e^{\frac{1}{2a}} \right] + \left(\frac{s^2}{2} + 1 \right) \langle \Psi | \Psi \rangle \right]. \quad (4.34)$$

In diesem Term wird der Faktor $(\cosh(4b) \pm e^{-2ab^2})$ umgeschrieben zu $(\cosh(4b) - 1 + 1 \pm e^{-2ab^2})$ sodass der zweite Teil mit dem Faktor $\sqrt{\frac{\pi}{2a}}$ als Vielfaches des Nenners identifiziert werden kann. Damit lässt sich der Term vereinfachen zu

$$= (n+1)^2 \left[\sqrt{\frac{\pi}{2a}} \left[s^2 (\cosh(4b) - 1) e^{\frac{2}{a}} - 4s (\cosh(2b) - 1) e^{\frac{1}{2a}} \right] + \left(\frac{s^2}{2} + 1 + \frac{s^2}{2} e^{\frac{2}{a}} - 2se^{\frac{1}{2a}} \right) \langle \Psi | \Psi \rangle \right] \quad (4.35)$$

und mit $\cosh(2x) - 1 = 2 \sinh^2(x)$ ergibt sich

$$= (n+1)^2 \left[\sqrt{\frac{\pi}{2a}} \left(2s^2 \sinh^2(2b) e^{\frac{2}{a}} - 8s \sinh^2(b) e^{\frac{1}{2a}} \right) + \left(\frac{s^2}{2} + 1 + \frac{s^2}{2} e^{\frac{2}{a}} - 2se^{\frac{1}{2a}} \right) \langle \Psi | \Psi \rangle \right] \quad (4.36)$$

$$= (n+1)^2 \left[\sqrt{\frac{\pi}{2a}} \left(8se^{\frac{1}{2a}} \sinh^2(b) (se^{\frac{3}{2a}} \cosh^2(b) - 1) \right) + \left(\frac{s^2}{2} + 1 + \frac{s^2}{2} e^{\frac{2}{a}} - 2se^{\frac{1}{2a}} \right) \langle \Psi | \Psi \rangle \right] \quad (4.37)$$

Wenn nun die Terme (4.8), (4.21) und (4.37) in den Quotienten eingesetzt werden, wird noch der Vorfaktor $\sqrt{\frac{2\pi}{a}}$ in allen Teilen gekürzt und die Energie der Testfunktion lautet

$$E_{s,n}(a,b) = \frac{\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = a \mp \frac{e^{-2ab^2} 4a^2 b^2}{(1 \pm e^{-2ab^2})} + (n+1)^2 \left[\frac{s^2}{2} (1 + e^{\frac{2}{a}}) - 2s(e^{\frac{1}{2a}}) + 1 + \frac{(4se^{\frac{1}{2a}} \sinh^2(b)(se^{\frac{3}{2a}} \cosh^2(b) - 1))}{(1 \pm e^{-2ab^2})} \right]. \quad (4.38)$$

4.2 Minimierung der Energie

Die Energie $E_{s,n}(a,b)$ hängt von den Parametern s und n und von den Variablen a und b ab. Gemäß dem Variationsverfahren wird nun das Minimum dieser Funktion bestimmt. Dazu sind zunächst die Ableitungen nach den jeweiligen Variablen zu bilden und gleich 0 zu setzen gemäß

$$\frac{d}{da} \frac{\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \stackrel{!}{=} 0 \quad \text{und} \quad \frac{d}{db} \frac{\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \stackrel{!}{=} 0. \quad (4.39)$$

Die Ableitungen nach den jeweiligen Variablen sind l anglich, weshalb hier nur die Ergebnisse angegeben werden.

$$\begin{aligned} \frac{d}{da} \frac{\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} &= \mp \frac{e^{-2ab^2} 8ab^2 (1 - ab^2 \pm e^{-2ab^2})}{(1 \pm e^{-2ab^2})^2} + (n+1)^2 \left(-\frac{s^2}{a^2} e^{\frac{2}{a}} + \frac{s}{a^2} e^{\frac{1}{2a}} \right) \\ &+ (n+1)^2 \frac{\left(4s \sinh^2(b) \left(\frac{-2s}{a^2} e^{\frac{2}{a}} \cosh^2(b) + \frac{1}{2a^2} e^{\frac{1}{2a}} \right) \right) (1 \pm e^{-2ab^2})}{(1 \pm e^{-2ab^2})^2} \\ &\pm (n+1)^2 \frac{8b^2 s e^{-2ab^2} e^{\frac{1}{2a}} \sinh^2(b) (se^{\frac{3}{2a}} \cosh^2(b) - 1)}{(1 \pm e^{-2ab^2})^2} \stackrel{!}{=} 0 \end{aligned} \quad (4.40)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{db} \frac{\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} &= \mp 8a^2 b e^{-2ab^2} \frac{1 - 2ab^2 \pm e^{-2ab^2}}{(1 \pm e^{-2ab^2})^2} \\ &+ (n+1)^2 s e^{\frac{1}{2a}} \frac{\left(se^{\frac{3}{2a}} 2 \sinh(4b) - 4 \sinh(2b) \right) (1 \pm e^{-2ab^2})}{(1 \pm e^{-2ab^2})^2} \\ &\pm (n+1)^2 8ab s e^{\frac{1}{2a}} \frac{\left(se^{\frac{3}{2a}} \sinh^2(2b) - 4 \sinh^2(b) \right) e^{-2ab^2}}{(1 \pm e^{-2ab^2})^2} \stackrel{!}{=} 0 \end{aligned} \quad (4.41)$$

Nun werden beide Gleichngen (4.40) und (4.41) zur Vereinfachung mit dem Faktor $(1 \pm e^{-2ab^2})^2$ multipliziert. Die Gleichung (4.40) wird zu

$$\begin{aligned} (1 \pm e^{-2ab^2})^2 \mp e^{-2ab^2} 8ab^2 (1 - ab^2 \pm e^{-2ab^2}) &+ (1 \pm e^{-2ab^2})^2 (n+1)^2 \left(-\frac{s^2}{a^2} e^{\frac{2}{a}} + \frac{s}{a^2} e^{\frac{1}{2a}} \right) \\ + (n+1)^2 8s \sinh^2(b) \left(\frac{-2s}{a^2} e^{\frac{2}{a}} \cosh^2(b) + \frac{1}{2a^2} e^{\frac{1}{2a}} \right) &(1 \pm e^{-2ab^2}) \\ \pm (n+1)^2 16b^2 s e^{-2ab^2} e^{\frac{1}{2a}} \sinh^2(b) (se^{\frac{3}{2a}} \cosh^2(b) - 1) &\stackrel{!}{=} 0 \end{aligned} \quad (4.42)$$

und die Gleichung (4.41) wird zu

$$\begin{aligned}
& \mp 8a^2be^{-2ab^2}(1 - 2ab^2 \pm e^{-2ab^2}) \\
& + (n+1)^2se^{\frac{1}{2a}} \left(se^{\frac{3}{2a}} 2 \sinh(4b) - 4 \sinh(2b) \right) (1 \pm e^{-2ab^2}) \\
& \pm (n+1)^2 4abse^{\frac{1}{2a}} \left(se^{\frac{3}{2a}} \sinh^2(2b) - 4 \sinh^2(b) \right) e^{-2ab^2} \stackrel{!}{=} 0.
\end{aligned} \tag{4.43}$$

Da die Nullstellen nicht analytisch bestimmt werden können, wird zu deren Bestimmung das inexakte Newton-Verfahren im Zweidimensionalen verwendet. Dies wird für die Parameter $n = 1, 2, 3, 4$ durchgeführt und für $0 < s < 1$. Die gefundenen Ergebnisse werden im nächsten Kapitel graphisch dargestellt, im Anhang finden sich die zugehörigen Werte in Tabellen. Das inexakte Newtonverfahren unterscheidet sich vom üblichen Newtonverfahren nur in der Bestimmung der notwendigen Ableitungen. Beim inexakten Newtonverfahren werden anders als beim eigentlichen Newtonverfahren die Ableitungen numerisch bestimmt. Der zugehörige Programmcode befindet sich auf der beigelegten CD.

4.3 Vergleich mit den exakten Energien

Um nun die Güte der Testfunktion einschätzen zu können, werden die Ergebnisse mit den exakten Eigenenergien verglichen. Die exakten Eigenenergien des Grundzustandes und des ersten angeregten Zustandes lauten [6]

$n = 1$	$\epsilon_0 = -(4s + 1) + n_0$	(4.44)
	$\epsilon_1 = 4s - 1 + n_0$	
$n = 2$	$\epsilon_0 = -2(\sqrt{1 + 36s^2} + 1) + n_0$	
	$\epsilon_1 = -4 + n_0$	
$n = 3$	$\epsilon_0 = -5 - 8s - 4\sqrt{1 - 4s + 16s^2} + n_0$	
	$\epsilon_1 = -5 + 8s - 4\sqrt{1 + 4s + 16s^2} + n_0$	
$n = 4$	$\epsilon_0 = -4\sqrt{\frac{4}{3}}p \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(\frac{q}{2}\sqrt{\frac{27}{p^3}}\right) - \frac{\pi}{3}\right) - \frac{20}{3} + n_0$	
	$\epsilon_1 = 2(-5 - \sqrt{9 + 100s^2}) + n_0$	
	$p = 1600s^2 + \frac{208}{2}$	
	$q = \frac{25600}{3}s^2 - \frac{4480}{27}$	
	$n_0 = (n+1)^2(s^2 + 1)$	

Die für den Parameter $n = 1$ und $0 < s < 1$ gefundenen Energien und die Eigenenergie des Systems im Grundzustand sind in der Abbildung 3 gezeigt. Es sei noch kurz daran erinnert, dass der Abstand der Mulden und die Höhe des Maximums in der Mitte mit kleiner werdendem s steigt.

In der Abbildung 3 ist zusätzlich ein lokales Minimum der Energiefunktion aufgetragen. Dieses lokale Minimum wurde für den Wert des Verschiebungsparameters $b = 0$ gefunden, so entspricht die Testfunktion einer einfachen Gaußkurve. Die Werte des lokalen Minimums sind nur für den Parameterwert $s > 0,22$ aufgetragen, da die Energiewerte für noch kleinere s

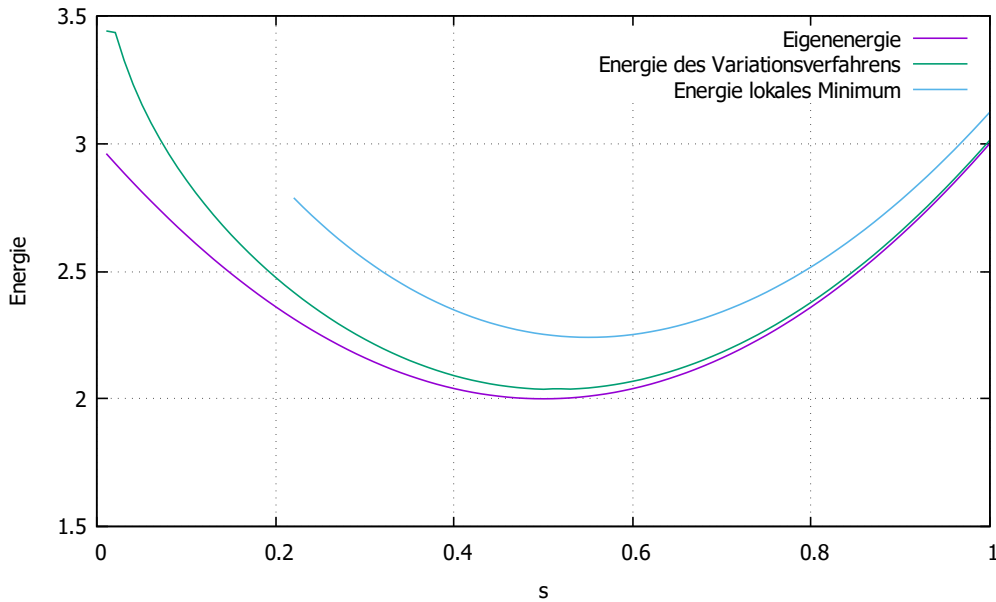


Abbildung 3: Exakte Eigenenergie und ein lokales und das globale Minimum der Energie der Testfunktion im Grundzustand gegen den Parameter s bei $n=1$

sehr stark ansteigen und keine hilfreichen Werte liefern. Für kleine Werte von s , also eine starke Ausprägung der Doppelmuldengestalt, können keine guten Ergebnisse von einer einfachen Gaußfunktion erwartet werden. Bemerkenswert sind die guten Ergebnisse dieser simplen Funktion für große Werte von s .

Betrachtet man das globale Minimum der Energiefunktion liefert die Testfunktion für $s > 0,6$ sogar sehr gute Werte. Die Testfunktion liefert für eine schwache Ausprägung der Doppelmuldengestalt die besseren Werte.

Für den ersten angeregten Zustand ist der Vergleich zwischen Testfunktion und Eigenenergie in der Abbildung 4 aufgetragen. Auch für den ersten angeregten Zustand liefert die Testfunktion vor allem für große Werte von s sehr gute Werte.

Da die exakten Eigenenergien für verschiedene Werte von n ähnliche Gestalt haben, wird für die künftigen Vergleiche nur noch die Energiedifferenz zwischen der Testfunktion und der Eigenenergie dargestellt. Diese Energiedifferenz ist nun für den Grundzustand und verschiedene Werte für n in der Abbildung 5 dargestellt. Die Abbildung 5 zeigt sehr deutlich, dass die Energiedifferenzen für verschiedene Werte von n zwar quantitativ unterschiedlich sind, aber qualitativ die gleiche Struktur haben. Ebenso werden die verschiedenen Parameterwerte in Abhängigkeit von s und n untersucht. Die Ergebnisse dieser Untersuchung sind in den Abbildungen 6 und 7 dargestellt.

Es zeigt sich erneut, dass es zwar quantitative Unterschiede für verschiedene Werte von n gibt, die qualitative Struktur jedoch für beide Parameter gleich ist.

Aufgrund dieser qualitativen Ähnlichkeit sowohl der Energiedifferenz als auch der Funktionsgestalt wird in einem folgenden Kapitel repräsentativ für den Wert $n=1$ die Ursache für die Abweichung gesucht.

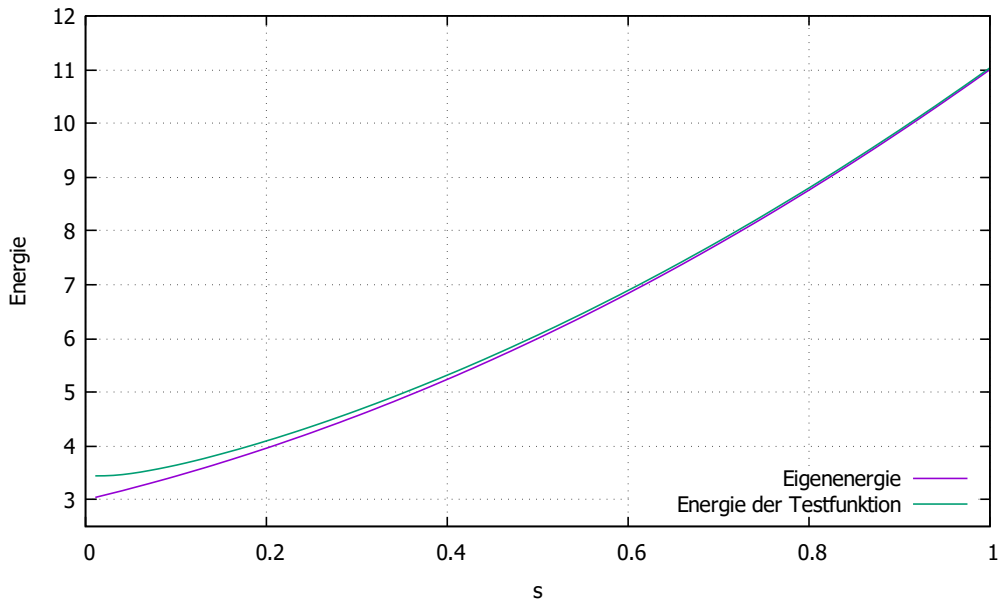


Abbildung 4: Exakte Eigenenergie und Energie der Testfunktion des ersten angeregten Zustandes gegen den Parameter s bei $n = 1$

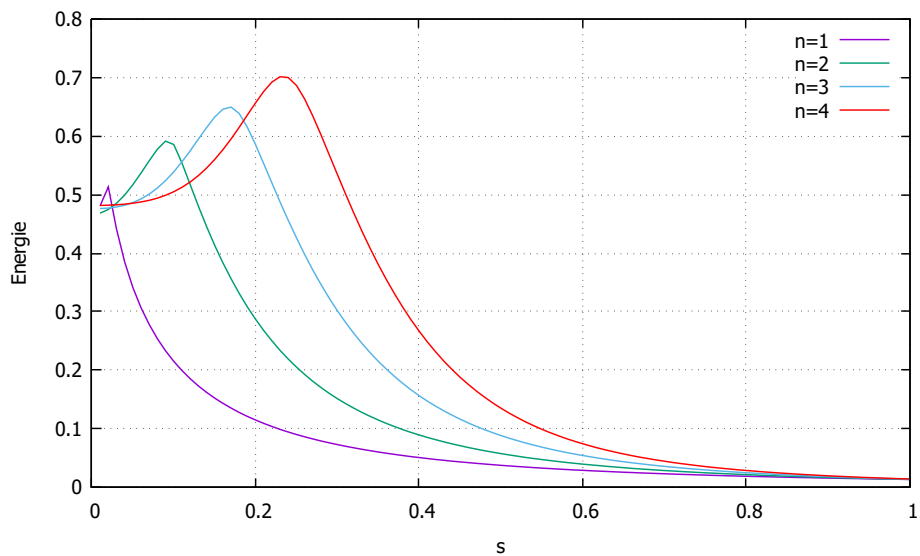


Abbildung 5: Differenz zwischen exakter Eigenenergie und der Energie der Testfunktion des Grundzustandes gegen den Parameter s für verschiedene Werte von n

Der gleiche Vergleich zwischen Energie und den Parameterwerten wird nun ebenso für den ersten angeregten Zustand durchgeführt. Die Energiedifferenz ist in Abbildung 8 und der Vergleich der Parameter ist in Abbildungen 9 und 10 dargestellt. Auch für den ersten angeregten Zustand unterscheiden sich die Energiedifferenz und Parameterwerte zwar quantitativ, zeigen aber qualitativ ähnliches Verhalten. Deshalb wird auch für den ersten angeregten Zustand repräsentativ der Fall $n=1$ untersucht. Zunächst kann schon festgestellt werden, dass

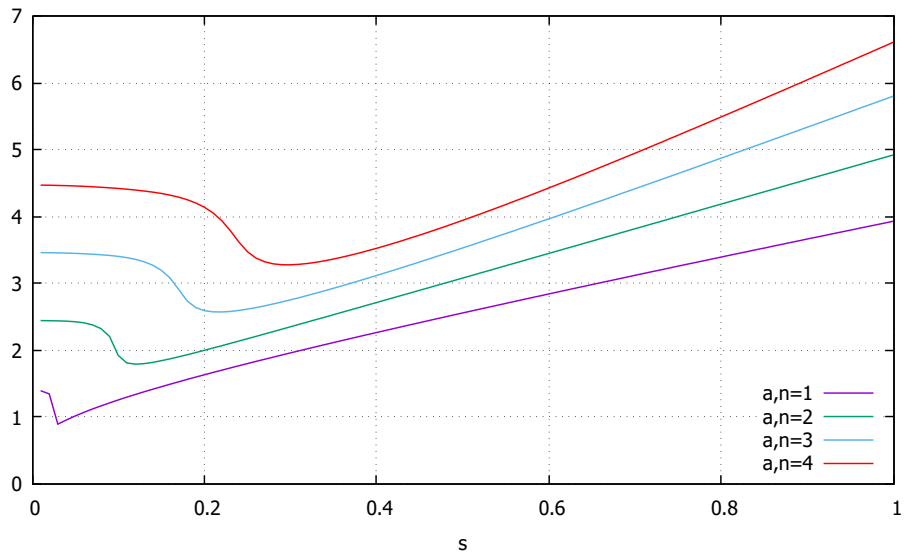


Abbildung 6: Werte des Streckungsparameters a der Gaußkurve gegen den Parameter s des Potentials für verschiedene Werte von n für den Grundzustand

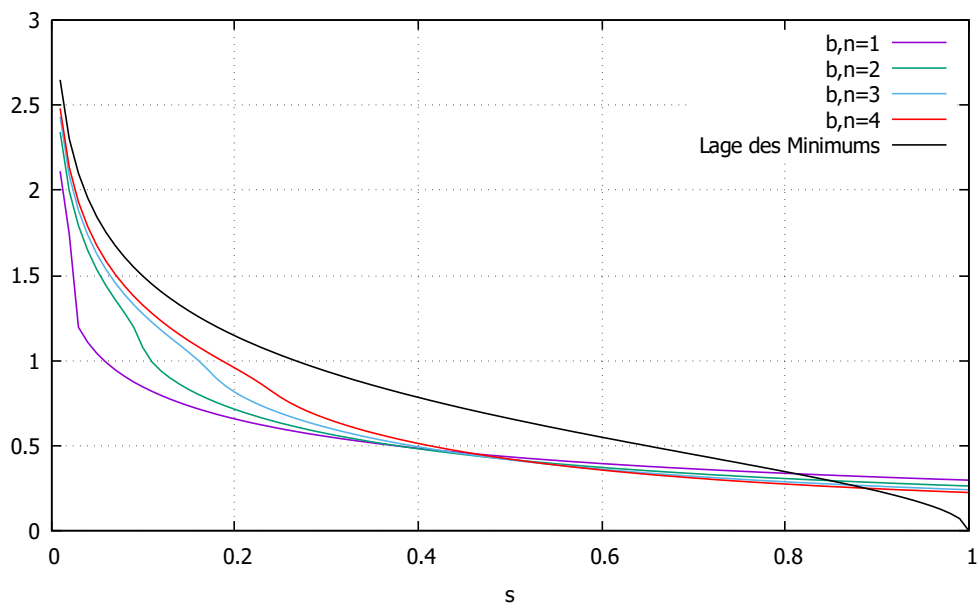


Abbildung 7: Werte des Verschiebungsparameters b der Testfunktion gegen den Parameter s des Potentials für verschiedene Werte von n und die Lage des Minimums des Potentials für den Grundzustand, die Lage des Minimums hängt nicht von n ab

die Energiedifferenz des ersten angeregten Zustandes leicht geringer ist als die des Grundzustandes.

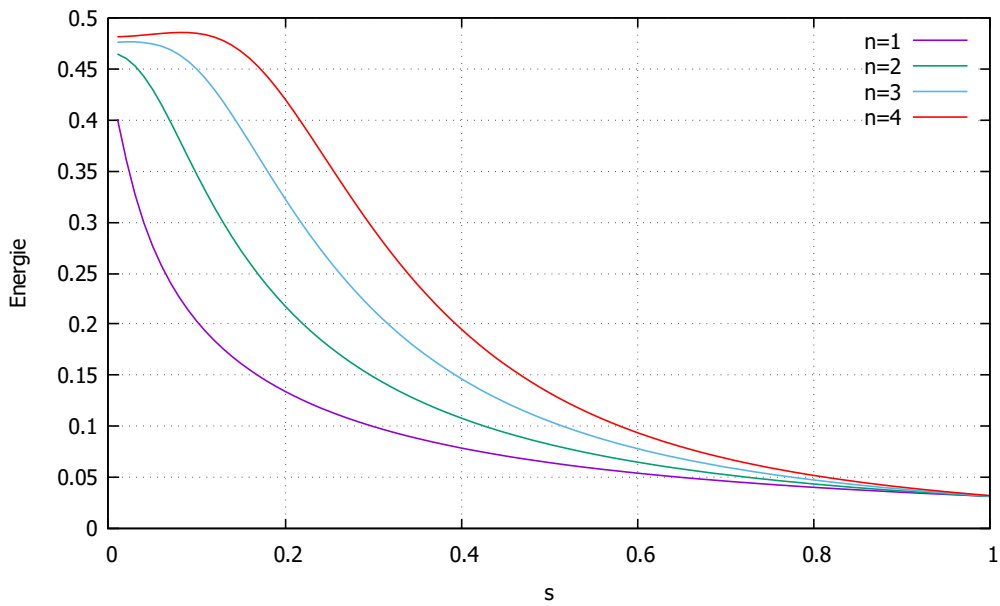


Abbildung 8: Differenz zwischen exakter Eigenenergie und der Energie der Testfunktion des ersten angeregten Zustandes gegen den Parameter s für verschiedene Werte von n

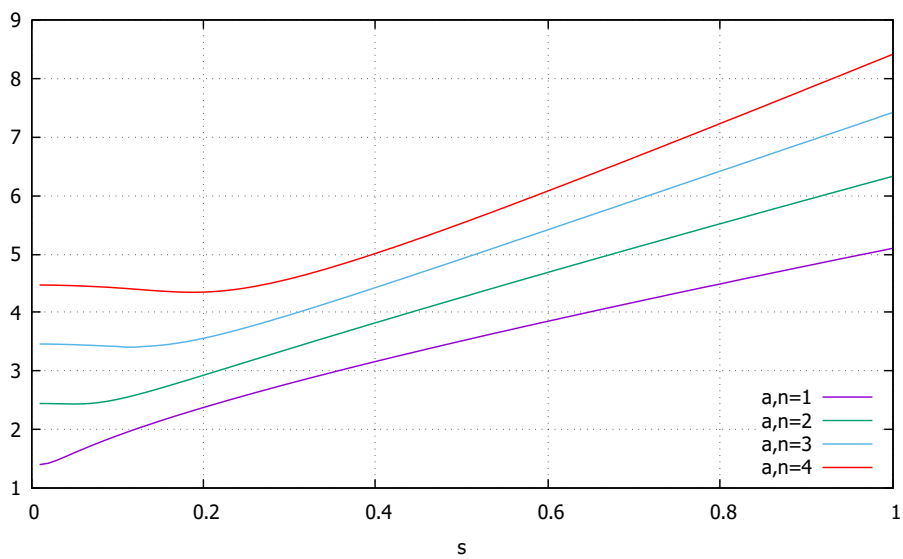


Abbildung 9: Werte des Streckungsparameters a der Gaußkurve gegen den Parameter s des Potentials für verschiedene Werte von n im ersten angeregten Zustand

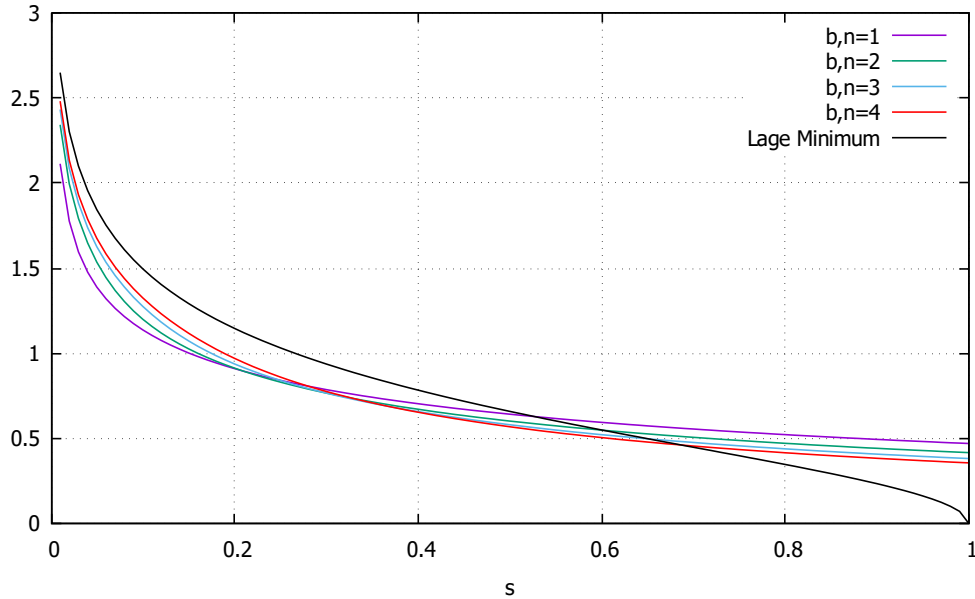


Abbildung 10: Werte des Verschiebungsparameters b der Testfunktion gegen den Parameter s des Potentials für verschiedene Werte von n im ersten angeregten Zustand und die Lage des Minimums des Potentials, die Lage des Minimums hängt nicht von n ab

4.4 Vergleich mit den exakten Wellenfunktionen

Im vorherigen Kapitel wurden die Energiedifferenzen und Parameterwerte für verschiedene Werte von n und s untersucht. Für das Razavy-Potential sind die Wellenfunktionen des Grundzustandes und des ersten angeregten Zustandes bekannt, deshalb können auch die Wellenfunktionen untersucht werden und so die Gründe für die Energiedifferenz zwischen Testfunktion und exakter Wellenfunktion gefunden werden. Dies wird nun wie oben bereits beschrieben beispielhaft für $n = 1$ getan.

4.4.1 Vergleich der Wellenfunktionen des Grundzustandes

Die exakte Grundzustandswellenfunktion des Razavy-Potentials hat für den Parameterwert $n=1$ die Gestalt [6]

$$\Psi_0(x) = c_s \cosh(x) e^{-s \cosh(2x)} \quad (4.45)$$

mit c_s als Normierungsparameter. Um zunächst einen Eindruck der Wellenfunktion und der Güte zu bekommen, wird der Vergleich für den Parameter $s = 0,85$ gemacht. Für Werte von s in diesem Bereich ist die Energiedifferenz sehr klein, weshalb auch eine große Übereinstimmung zwischen Testfunktion und exakter Funktion erwartet wird. Der Vergleich ist in Abbildung 11 dargestellt.

Beide Wellenfunktionen stimmen sehr gut überein. Außerdem zeigt die Abbildung sehr deutlich, dass die Wellenfunktion für große Werte von s trotz der Doppelmuldengestalt um $x = 0$ zentriert ist. Grund dafür ist, dass die Energie des Grundzustandes mit 2,49 wesentlich größer ist als das Maximum des Potentials im Zentrum. Die exakte Eigenenergie ist für alle Werte

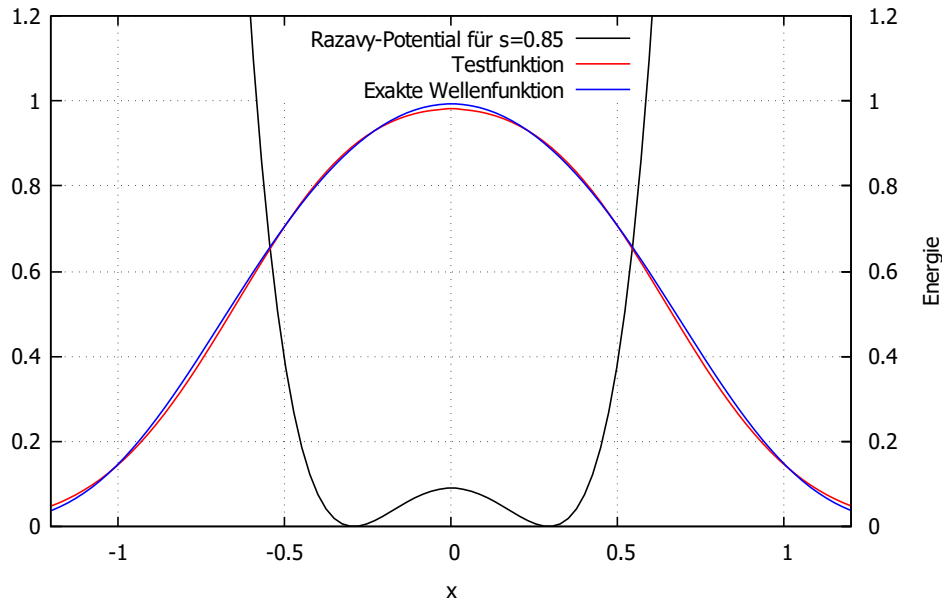


Abbildung 11: Vergleich zwischen Testfunktion und exakter Funktion des Grundzustandes für $n=1$ und $s = 0,85$, die exakte Eigenenergie ist $2,49$, linke Ordinatenachse für die Wellenfunktionen, rechte Ordinatenachse für Potential

$s > 0,25$ größer als das Potential im Zentrum und für alle Werte $s < 0,25$ kleiner als der Wert des Potentials im Zentrum. Deshalb ist die Wellenfunktion für große Werte von s um $x = 0$ zentriert und für kleine Werte von s hat die Wellenfunktion ein Minimum im Zentrum und jeweils ein Maximum nahe der Minima des Potentials.

Um nun zu bestimmen, ab welchem Parameterwert von s die Wellenfunktion ein Minimum im Zentrum aufweist, wird der Wert der zweiten Ableitung bei $x = 0$ bestimmt. Da die Wellenfunktion gerade ist, findet sich bei $x = 0$ ein Extremum. Um nun zu testen, ob es sich im Zentrum um ein Minimum oder ein Maximum handelt, wird der Wert der zweiten Ableitung benötigt. Der Wert der zweiten Ableitung hängt von s ab und ist kleiner 0 für alle $s > 0,25$ und größer 0 für alle $s < 0,25$. Damit stimmt der Wechsel zwischen Maximum und Minimum genau mit dem Punkt überein, an dem die Eigenenergie des Systems kleiner wird als der Wert des Potentials im Zentrum. Dies gilt für $n=1$. Wird n größer gewählt, weist die Wellenfunktion bereits für größere s ein Minimum im Zentrum auf.

Eine vergleichbare Entwicklung zeigt die Testfunktion, der Verschiebungsparameter b steigt mit kleiner werdendem s und so geht die Testfunktion ebenfalls von einer um die Mitte zentrierten Glocke in eine Funktion mit zwei Maxima nahe der Minima des Potentials über.

Ein anderer interessanter Aspekt ist das Verhalten der Energie der Testfunktion an der Stelle $s \approx 0,02$. In der Abbildung 5 kann an dieser Stelle ein „Knick“ gefunden werden. Ebenso zeigen die Parameter sprunghaftes Verhalten an dieser Stelle.

Die Beobachtungen im 3-dimensionalen Plot zeigen, dass in dem Bereich für s zwei verschiedene Minima vorhanden sind. An der Stelle $s = 0,0205$ löst ein Minimum das andere Minimum als globales Minimum ab, das Verhalten ähnelt dem eines Phasenübergangs erster Ordnung. Das Verhalten der Energiedifferenz und der Parameter in diesem Bereich ist in Abbildung 12

dargestellt.

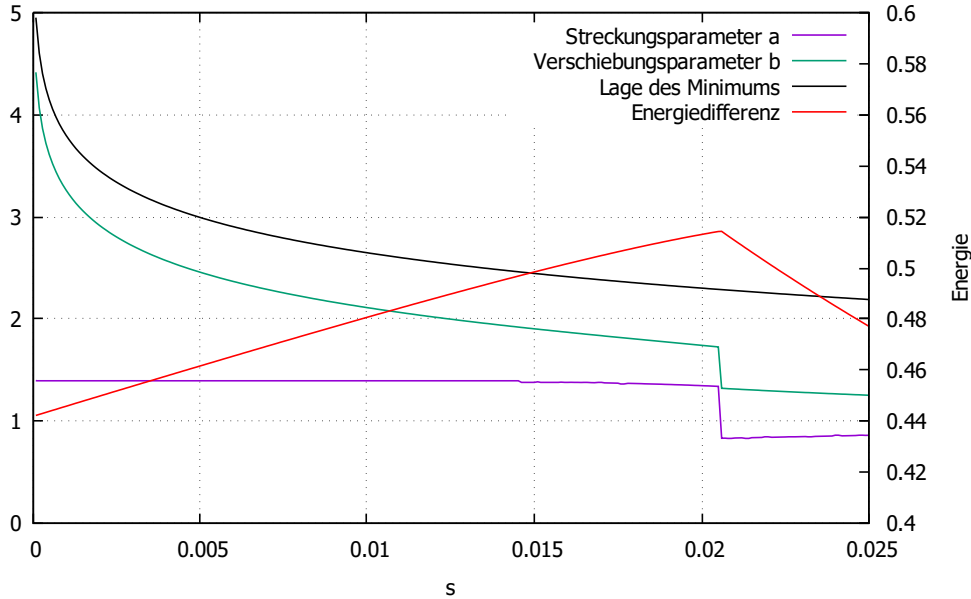


Abbildung 12: Verhalten der Energiedifferenz und der Parameter der Testfunktion im Grundzustand gegen s beim Maximum der Energiedifferenz für $n = 1$, linke Ordinatenachse für die Parameter, rechte Ordinatenachse für Energiedifferenz

Um dieses Verhalten gut deuten zu können, werden noch die beiden Testfunktionen kurz vor und nach dem Phasenübergang mit der exakten Funktion im Phasenübergang verglichen. Das Ergebnis ist in Abbildung 13 dargestellt.

Anhand dieser Abbildung kann man recht gut erkennen, weshalb die Testwellenfunktion gerade für diesen Parameterwert die schlechtesten Werte liefert. Die exakte Wellenfunktion hat einerseits zwei Maxima nahe der Minima des Potentials und immer noch eine recht hohe Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Zentrum. Die Testwellenfunktion kann nicht gleichzeitig die Maxima außen und die recht hohen Werte im Zentrum wiedergeben. Die Funktion für $s = 0,0206$ gibt die hohe Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Zentrum recht gut wieder, passt aber schlecht mit den Maxima am Rand zusammen. Für größer werdende s sind die Maxima am Rand weniger stark ausgeprägt und die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Mitte steigt an, somit werden die Werte für steigendes s besser.

Analog dazu kann die Funktion für $s = 0,0204$ zwar die Maxima am Rand gut wiedergeben, kann aber die hohe Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Zentrum nicht reproduzieren. Für kleiner werdende s wird diese Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Zentrum kleiner und die Maxima am Rand steigen an, was die kleiner werdende Energiedifferenz erklärt.

Dieses Verhalten kann ebenso auf die Grundzustandswellenfunktion für $n = 2, 3, 4$ übertragen werden. Der Übergang ist dann kein scharfer Phasenübergang mehr, aber das Verhalten ist ansonsten analog.

Die oben beschriebenen Schwierigkeiten der Testfunktion in einem bestimmten Bereich von s treten dabei für größere n bereits für größere s auf. Durch die Skalierung mit dem Faktor $(n + 1)^2$ wird der kritische Zustand mit zwei ausgeprägten Maxima und hoher Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Zentrum bereits für größere Werte von s erreicht.

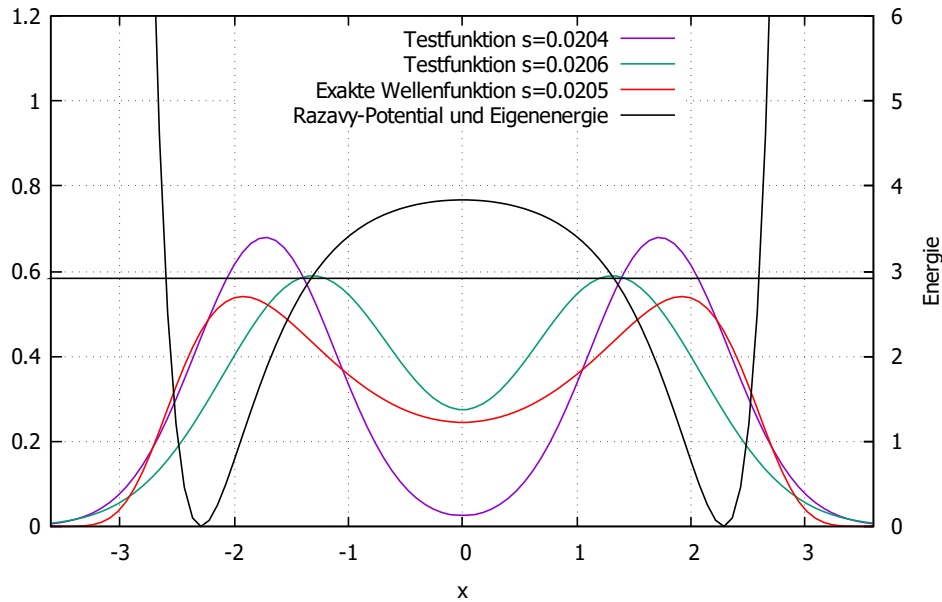


Abbildung 13: Potential und Eigenenergie, exakte Grundzustandswellenfunktion und die Testwellenfunktionen nahe dem Maximum der Energiedifferenz, linke Ordinatensachse für die Wellenfunktionen, rechte Ordinatensachse für Potential und Eigenenergie

4.4.2 Vergleich der Wellenfunktionen des ersten angeregten Zustandes

In diesem Teil sollen nun analog zum vorherigen Kapitel die exakten Wellenfunktionen und die Testwellenfunktionen des ersten angeregten Zustandes verglichen werden. Dazu werden die Wellenfunktionen für die Parameter $s = 0,85$ und $s = 0,05$ verglichen. Die exakte Wellenfunktion des ersten angeregten Zustandes für $n=1$ lautet [6]

$$\Psi_1(x) = d_s \sinh(x) e^{-s \cosh(2x)} \quad (4.46)$$

mit d_s als Normierungsparameter. Die Vergleiche sind in den Abbildungen 14 und 15 dargestellt.

Aufgrund der steigenden Energiedifferenz für kleine s wird eine sehr gute Übereinstimmung der Wellenfunktionen für $s = 0,85$ erwartet und eine grobe Übereinstimmung für $s = 0,05$. Dieses Verhalten spiegelt sich in den Abbildungen 14 und 15 wider. Es lassen sich keine groben Unterschiede finden, es handelt sich vor allem um leichte Ungenauigkeiten. Die Testfunktionen scheinen gut gewählt zu sein.

Sowohl für den Grundzustand als auch für den ersten angeregten Zustand zeigen die Wellenfunktionen ähnliches Verhalten. Für große Werte von s passen die Funktionen sehr gut, zeigen aber kein gutes Verhalten für sehr kleine s .

Ein anderer interessanter Aspekt kann beobachtet werden, wenn die Parameterwerte für den Grundzustand nach dem Phasenübergang mit den Parameterwerten des ersten angeregten Zustandes verglichen werden. Die beiden Parameterwerte sind nahezu identisch. Dies kann in

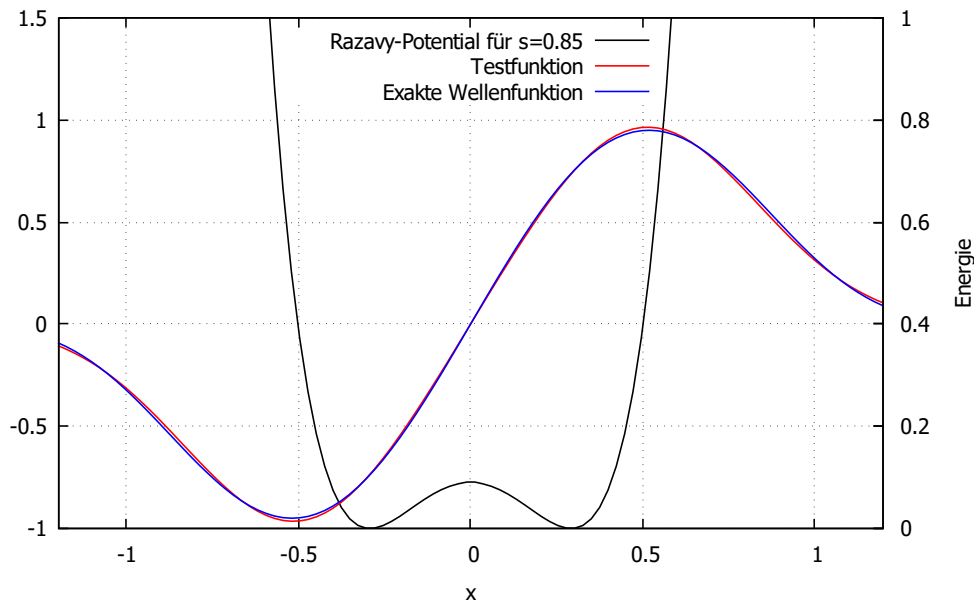


Abbildung 14: Vergleich zwischen Testfunktion und exakter Funktion des ersten angeregten Zustandes für $n=1$ und $s = 0,85$, die exakte Energie ist $9,29$, linke Ordinatenachse für die Wellenfunktionen, rechte Ordinatenachse für das Potential

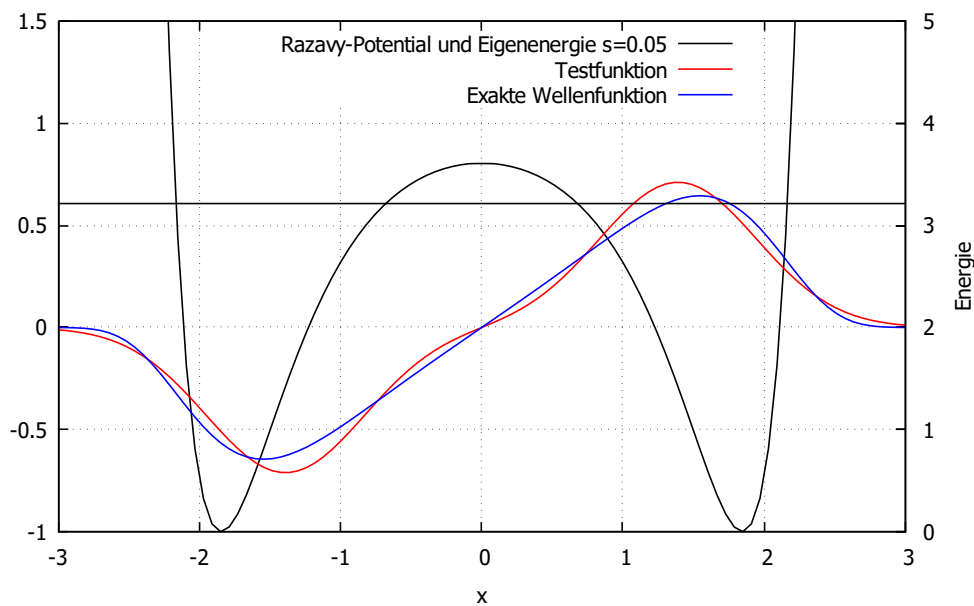


Abbildung 15: Vergleich zwischen Testfunktion und exakter Funktion des ersten angeregten Zustandes für $n=1$ und $s = 0,05$, linke Ordinatenachse für die Wellenfunktionen, rechte Ordinatenachse für Potential und Eigenenergie

der Abbildung 16 für kleine s sehr gut beobachtet werden, dort sind die Parameterwerte für den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand aufgetragen.

Das kann so gedeutet werden, dass nach dem Phasenübergang des Grundzustandes die Näherung durch die beiden verschobenen Gaußfunktionen nicht mehr die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Zentrum wiedergibt. Die verwendete Testfunktion behandelt die beiden Mulden im Grundzustand nahezu als getrennt und fokussiert sich auf die gegebenen Mulden. Da der erste angeregte Zustand ohnehin keine Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Zentrum hat, fokussiert sich dieser ebenfalls auf die Mulden. Deshalb stimmen die Parameter für sehr kleine s so gut überein.

4.5 Vergleich mit dem harmonischen Oszillator

Die guten Ergebnisse durch die Testwellenfunktion zweier verschobener Gaußkurven leiten zu einer weiteren Fragestellung: Wie ähnlich ist das Razavy-Potential zwei verschobenen harmonischen Oszillatoren?

Die Gaußkurve ist die exakte Grundzustandswellenfunktion des harmonischen Oszillators und liefert gute Ergebnisse, könnte man also das Potential durch zwei verschobene harmonische Oszillatoren nähern und ebenso die Wellenfunktion als Summe der beiden zugehörigen Eigenfunktionen darstellen? Dies soll nun untersucht werden.

Dazu wird das Razavy-Potential jeweils um die beiden Minima entsprechend der Taylor-Entwicklung genähert und im Anschluss werden die Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators mit den gefundenen Testwellenfunktionen und der exakten Wellenfunktion verglichen. Es wird wieder das Potential in seiner einfachen Form

$$v(x) = (n + 1)^2 [s \cosh(2x) - 1]^2 \quad (4.47)$$

verwendet

Mit den bereits besprochenen Skalierungen hat die Schrödingergleichung die Form

$$-\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + v(x) \Psi(x) = \epsilon \Psi(x) \quad (4.48)$$

$$\Leftrightarrow \frac{-1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + \frac{m}{2} \frac{v(x)}{m^2} \Psi(x) = \frac{\epsilon}{2m} \Psi(x) \quad (4.49)$$

Die Minima des Potentials liegen bei [6]

$$\tilde{x}_{\pm} = \pm \frac{1}{2} \cosh^{-1}\left(\frac{1}{s}\right) \quad \text{mit} \quad v(\tilde{x}) = 0. \quad (4.50)$$

Die Taylorentwicklung soll bis zur zweiten Ordnung durchgeführt werden, da der natürliche harmonische Oszillator eine quadratische Abhängigkeit vom Ort hat. Für die Taylorentwicklung gilt dann

$$v_{HO}(x) = \left\{ \begin{array}{ll} \mathcal{T}_2(v(x), \tilde{x}_-) & \text{falls } x < 0 \\ \mathcal{T}_2(v(x), \tilde{x}_+) & \text{falls } x \geq 0 \end{array} \right\} \quad (4.51)$$

Da es sich um ein Minimum mit Wert 0 handelt, tragen bei der Taylorentwicklung nur Terme

ab der zweiten Ableitung bei.

$$v''(\tilde{x}) = 8(n+1)^2 \left[s^2 \cosh(4\tilde{x}) - s \cosh(2\tilde{x}) \right] \quad \cosh(2\tilde{x}) = \frac{1}{s} \quad (4.52)$$

$$= 8(n+1)^2 \left[s^2 (\cosh^2(2\tilde{x}) + \sinh^2(2\tilde{x})) - s \frac{1}{s} \right] \quad \sinh^2(x) = \cosh^2(x) - 1 \quad (4.53)$$

$$= 8(n+1)^2 \left[s^2 \left(\frac{1}{s^2} + \frac{1}{s^2} - 1 \right) - 1 \right] \quad (4.54)$$

$$= 8(n+1)^2 \left[1 - s^2 \right]. \quad (4.55)$$

Setzt man die Taylor-Entwicklung bis zum zweiten Grad nun in die Schrödingergleichung ein, erhält man

$$\frac{-1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + \frac{m}{2} \underbrace{\frac{4(n+1)^2 [1-s^2]}{m^2}}_{\omega^2} (x - \tilde{x}_{\pm})^2 \Psi(x) = \frac{\epsilon}{2m} \Psi(x) \quad (4.56)$$

mit \tilde{x}_- falls $x < 0$ und \tilde{x}_+ sonst.

Das so genäherte Potential hat nun die Gestalt zweier harmonischer Oszillatoren. Die Eigenfunktionen dieser harmonischen Oszillatoren haben jeweils die Gestalt

$$\varphi_0 \propto e^{-\frac{1}{2}m\omega(x \mp \tilde{x})^2} = e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{4(n+1)^2[1-s^2]}{m^2}}m(x \mp \tilde{x})^2} = e^{-(n+1)\sqrt{1-s^2}(x \mp \tilde{x})^2}. \quad (4.57)$$

Die Form dieser Wellenfunktion gleicht der Testfunktion. Es können nun die gefundenen optimalen Parameter mit den genäherten Parametern für den harmonischen Oszillator verglichen werden. Für den Vergleich werden die Variablen a mit $(n+1)\sqrt{1-s^2}$ und b mit $\tilde{x} = \frac{1}{2} \cosh^{-1}(\frac{1}{s})$ verglichen. Der Vergleich der beiden Parameter für den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand mit den Parametern des harmonischen Oszillators geschieht parallel. Die Parameter für ein Potential aus zwei harmonischen Oszillatoren sind für den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand gleich, es ändert sich lediglich das Vorzeichen einer der beiden Gaußkurven.

Die gefundenen Parameter sind in der Abbildung 16 gegen den Wert des Parameters s für $n=1$ aufgetragen. Zur Erinnerung, die Testfunktion hat die Gestalt

$$\Psi(x) = e^{-a(x-b)^2} \pm e^{-a(x+b)^2}. \quad (4.58)$$

Man stellt zunächst eine sehr große Diskrepanz zwischen den Streckungsparametern a fest. Diese haben für die Testfunktion und den harmonischen Oszillator unterschiedliche Verläufe. Während die Testfunktion für große Werte von s hohe Werte von a und somit einen starken Abfall der Gaußkurve liefert, ergeben sich für die Näherung durch den harmonischen Oszillator kleine Werte von a und somit eine sehr weite Gaußkurve. Das entspricht auch den Erwartungen. Der Bereich nahe der Minima ist für große Werte von s sehr flach, sodass die Taylorentwicklung einen harmonischen Oszillator mit schwacher Rückstellkraft liefert und damit weite Gaußkurven. Gleichzeitig steigt das Potential etwas weiter außen sehr schnell an, was den starken Abfall in der Testfunktion erklärt. Die Näherung durch den harmonischen Oszillator ist damit für große s schlecht.

Interessanter wird der Vergleich der Parameter für kleine s , da das Potential in diesem Bereich auch eine stärker ausgeprägte Doppelmuldengestalt hat.

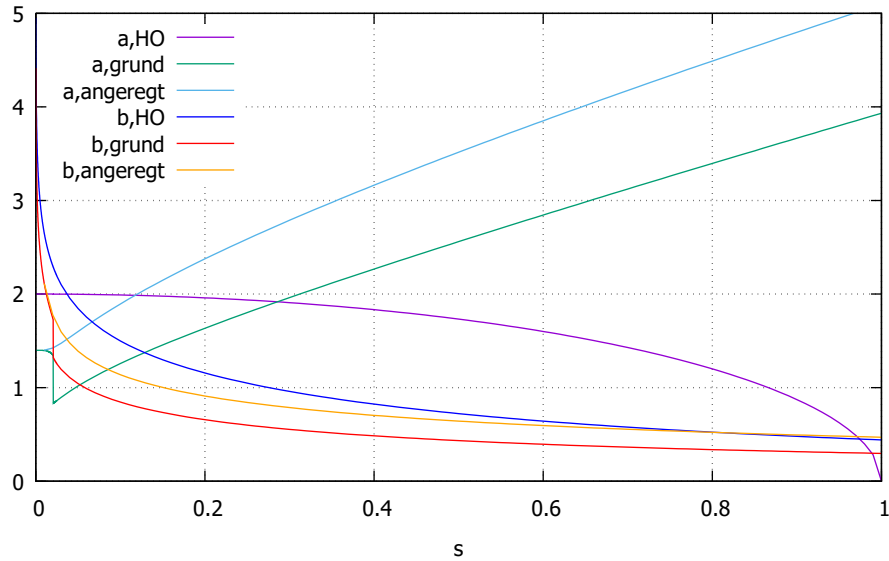


Abbildung 16: Vergleich zwischen den genäherten Parameterwerten für einen harmonischen Oszillator (HO) und den gefundenen Parameterwerten der Testfunktion im Grundzustand (grund) und im angeregten Zustand (angeregt)

Die Gründe für die Diskrepanz zwischen den Parameterwerten und die Güte der Näherung durch den harmonischen Oszillator (HO) können am besten graphisch erkannt werden. Dazu werden in der Abbildung 17 das Razavy-Potential, das genäherte Potential, die Eigenenergie, die exakte Grundzustandsfunktion und die Grundzustandsfunktionen der Testfunktion und des harmonischen Oszillators für $n=1$ und $s = 0,02$ aufgetragen.

Es lässt sich gut erkennen, dass die Näherung durch den harmonischen Oszillator nur in Bereichen sehr nahe der Minima gute Ergebnisse zeigt. Vor allem in Bereich um $x = 0$ weicht die Näherung durch den harmonischen Oszillator stark ab. Das Potential des harmonischen Oszillators ist bei $x = 0$ sehr hoch, während das Razavy-Potential nur leicht über dem exakten Energieeigenwert liegt. Das spiegelt sich auch in den Funktionswerten wieder. Vor allem die Wellenfunktion des harmonischen Oszillators ist im Bereich um $x = 0$ so gut wie 0, während die exakte Eigenfunktion kaum geringere Werte liefert als in der Nähe der Minima. Eben diese Schwäche hat auch die Testfunktion, diese kann ebenfalls den hohen Funktionswert im Zentrum und die schnell nach außen abfallenden Maxima nicht reproduzieren. Diese zu geringen Funktionswerte in der Nähe von $x = 0$ zeigen sich ebenfalls in den Wellenfunktionen der angeregten Zustände. Die jeweils ersten angeregten Zustände sind in der Abbildung 18 dargestellt. Auch im angeregten Zustand ist die Funktion des genäherten harmonischen Oszillators deutlich zu weit außen zentriert. Die Testfunktion liefert leicht bessere Ergebnisse, kann aber auch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit nahe von $x = 0$ nicht gut wiedergeben.

Abschließend kann zur Näherung durch den harmonischen Oszillator gesagt werden, dass die Näherung sowohl für kleine, als auch für große s keine guten Werte liefert. Dies gilt für den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand. Für große s gibt die Taylorentwicklung den Verlauf des Potentials für $|x| > \tilde{x}$ schlecht wieder, während für kleine s der Bereich um $x = 0$ schlecht reproduziert wird. Die beiden Mulden des Razavy-Potentials sind für eine

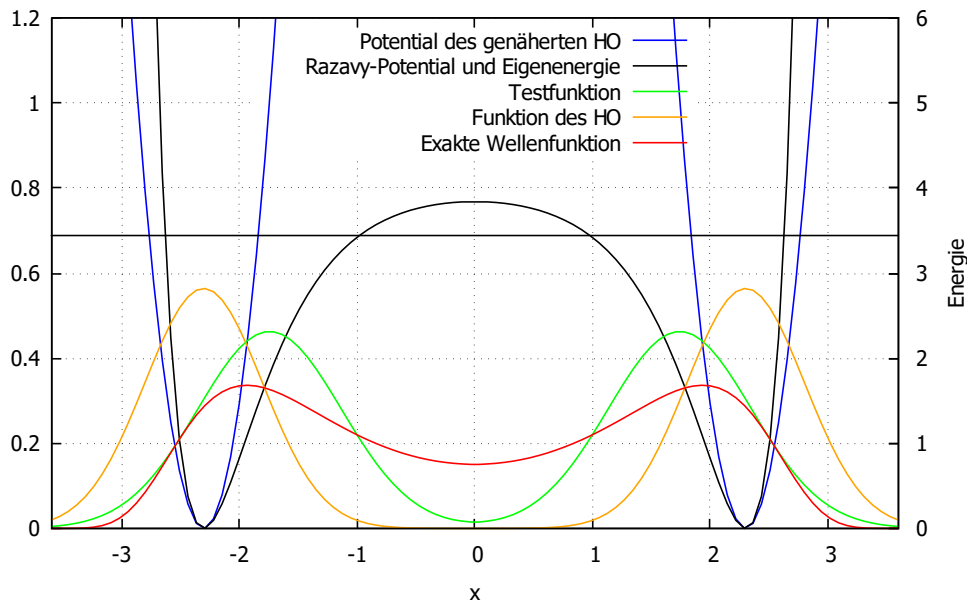


Abbildung 17: Razavy Potential, exakte Eigenenergie, exakte Wellenfunktion und Testfunktion im Grundzustand und das Potential des genäherten harmonischen Oszillators mit Grundzustandswellenfunktion gegen x , Wellenfunktionen linke Ordinatenachse, Potentiale und Eigenenergie rechte Ordinatenachse

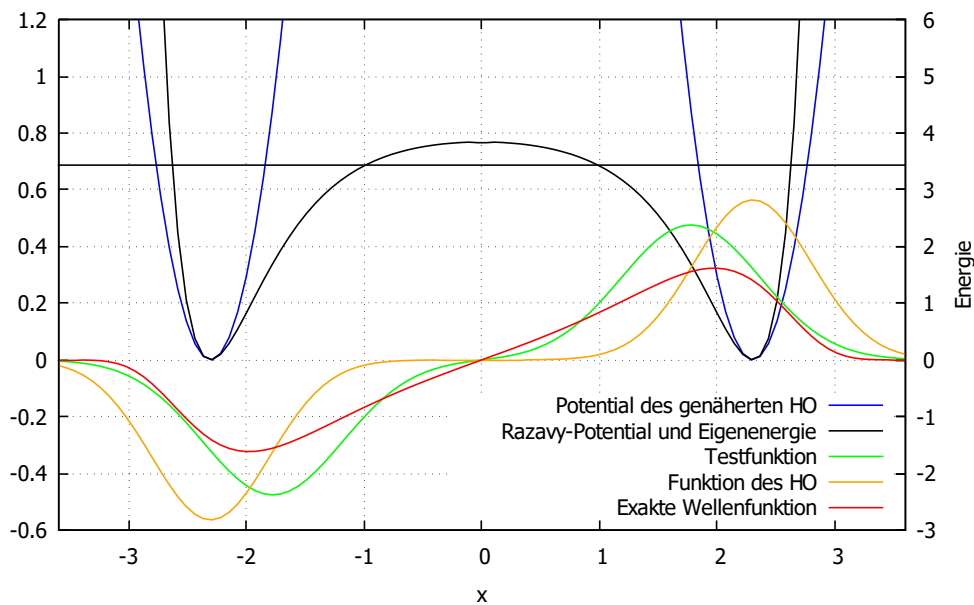


Abbildung 18: Razavy Potential, exakte Eigenenergie, exakte Wellenfunktion und Testfunktion im ersten angeregten Zustand und das Potential des genäherten harmonischen Oszillators mit angeregter Wellenfunktion gegen x , Wellenfunktionen linke Ordinatenachse, Potentiale und Eigenenergie rechte Ordinatenachse

solche Näherung nicht symmetrisch genug.

5 Testfunktion aus Produkt von Polynom und Gaußfunktion

Die Testfunktion aus zwei verschobenen Gaußkurven hat für den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand recht gute Werte geliefert. Dennoch soll eine zweite Testfunktion diskutiert werden. Einerseits wird versucht, noch bessere Ergebnisse für die oberen Schranken der Eigenenergien zu finden, andererseits lässt sich durch eine zweite Testfunktion untersuchen, wie wichtig die Wahl der Testfunktion ist.

Da die Testfunktion für alle größeren s ein Maximum bei $x = 0$ liefert und auch für kleine s nicht vernachlässigbare Funktionswerte bei $x = 0$ hat, wird als zweite Testfunktion eine Funktion gewählt, die natürlicherweise stärker um $x = 0$ zentriert ist. Gewählt wird ein Produkt aus einer um $x = 0$ zentrierten Gaußfunktion und einem Polynom. Dabei wird für den Grundzustand eine gerade Polynomfunktion und für den ersten angeregten Zustand eine ungerade Polynomfunktion gewählt. Damit lautet die neue Testfunktion

$$\Psi_{c,d,t}(x) = (x^l + cx^{2+l} + dx^{4+l})e^{-tx^2}, \quad (5.1)$$

für den Grundzustand gilt $l = 0$ und für den den ersten angeregten Zustand gilt $l = 1$.

5.1 Bestimmung der Energie

Nun wird analog zur vorherigen Testfunktion die Energie des Grundzustandes und des ersten angeregten Zustandes berechnet gemäß

$$E_{s,n}(c, d, t) = \frac{\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\langle \Psi | -\frac{d^2}{dx^2} + (n+1)^2 [s \cosh(2x) - 1]^2 | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (5.2)$$

Die Berechnung der Energie geschieht nach Möglichkeit wieder parallel für den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand. Dabei werden Nenner, Impulsterm und Potentialterm werden wieder getrennt voneinander bestimmt.

5.1.1 Berechnung des Nenners

Die Berechnung des Nenners liefert zunächst

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx \quad (5.3)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left((x^l + cx^{2+l} + dx^{4+l})e^{-tx^2} \right)^2 dx \quad (5.4)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(x^{2l} + (c^2 + 2d)x^{4+2l} + d^2x^{8+2l} + 2cx^{2+2l} + 2cdx^{6+2l} \right) e^{-2tx^2} dx. \quad (5.5)$$

Für gerade Ausgangsfunktionen($l = 0$) folgt dann

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(1 + 2cx^2 + (c^2 + 2d)x^4 + 2cdx^6 + d^2x^8\right) e^{-2tx^2} dx \quad (5.6)$$

$$= \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{2t}} + 2c \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2t}^3} + (c^2 + 2d) \frac{3\sqrt{\pi}}{4\sqrt{2t}^5} + 2cd \frac{15\sqrt{\pi}}{8\sqrt{2t}^7} + d^2 \frac{105\sqrt{\pi}}{16\sqrt{2t}^9} \quad (5.7)$$

$$= \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{1}{t^{\frac{1}{2}}} + \frac{c}{2t^{\frac{3}{2}}} + \frac{3(c^2 + 2d)}{16t^{\frac{5}{2}}} + \frac{15cd}{32t^{\frac{7}{2}}} + \frac{105d^2}{256t^{\frac{9}{2}}} \right) \quad (5.8)$$

und für ungerade Ausgangsfunktionen($l = 1$) folgt

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(x^2 + 2cx^4 + (c^2 + 2d)x^6 + 2cdx^8 + d^2x^{10}\right) e^{-2tx^2} dx \quad (5.9)$$

$$= \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2t}^3} + 2c \frac{3\sqrt{\pi}}{4\sqrt{2t}^5} + (c^2 + 2d) \frac{15\sqrt{\pi}}{8\sqrt{2t}^7} + 2cd \frac{105\sqrt{\pi}}{16\sqrt{2t}^9} + d^2 \frac{945\sqrt{\pi}}{32\sqrt{2t}^{11}} \quad (5.10)$$

$$= \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{1}{4t^{\frac{3}{2}}} + \frac{3c}{8t^{\frac{5}{2}}} + \frac{15(c^2 + 2d)}{64t^{\frac{7}{2}}} + \frac{105cd}{128t^{\frac{9}{2}}} + \frac{945d^2}{1024t^{\frac{11}{2}}} \right). \quad (5.11)$$

Auch die Berechnung des Zählers wird wieder in zwei Teile, die Berechnung des Impulsterms und die Berechnung des Potentialterms, aufgeteilt. Bei der Berechnung des Impulsterms und des Potentialterms werden nicht alle Zwischenschritte dargestellt, da die Berechnungen unkompliziert, aber länglich sind.

5.1.2 Berechnung des Impulsterms

Für den Impulsterm wird der Ausdruck

$$\langle \Psi | -\frac{d^2}{dx^2} | \Psi \rangle \quad (5.12)$$

$$= - \int_{-\infty}^{+\infty} \left((x^l + cx^{2+l} + dx^{4+l}) e^{-tx^2} \right) \left(\frac{d^2}{dx^2} \right) \left((x^l + cx^{2+l} + dx^{4+l}) e^{-tx^2} \right) dx \quad (\text{part.Integration}) \quad (5.13)$$

$$= + \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{d}{dx} \left((x^l + cx^{2+l} + dx^{4+l}) e^{-tx^2} \right) \right)^2 dx \quad (5.14)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} (lx^{l-1} + (2+l)cx^{l+1} + (4+l)dx^{l+3} - 2tx^{l+1} - 2tcx^{3+l} - 2tdx^{5+l})^2 e^{-2tx^2} dx \quad (5.15)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[l^2 x^{2l-2} + (2+l)^2 c^2 x^{2l+2} + (4+l)^2 d^2 x^{2l+6} + 4t^2 x^{2l+2} + 4t^2 c^2 x^{6+2l} + 4t^2 d^2 x^{10+2l} \right. \\ \left. + 2l(2+l)cx^{2l} + 2l(4+l)dx^{2l+2} - 4tlx^{2l} - 4ltxc^{2l+2} - 4ltdx^{2l+4} \right. \\ \left. + 2(2+l)(4+l)cdx^{2l+4} - 4(2+l)tcx^{2l+2} - 4(2+l)tc^2x^{2l+4} - 4(2+l)tcdx^{2l+6} \right. \\ \left. - 4(4+l)tdx^{2l+4} - 4(4+l)tcdx^{2l+6} - 4(4+l)td^2x^{2l+8} \right. \\ \left. + 8t^2cx^{2l+4} + 8t^2dx^{2l+6} + 8t^2cdx^{2l+8} \right] e^{-2tx^2} dx \quad (5.16)$$

gefunden. Nun werden gerade und ungerade Funktion getrennt behandelt, für die gerade Testfunktion ($l = 0$) ergibt sich

$$\begin{aligned}
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[0 + 4c^2x^2 + 16d^2x^6 + 4t^2x^2 + 4t^2c^2x^6 + 4t^2d^2x^{10} \right. \\
&\quad + 16cdx^4 - 8tcx^2 - 8tc^2x^4 - 8tcdx^6 \\
&\quad - 16tdx^4 - 16tcdx^6 - 16td^2x^8 \\
&\quad \left. + 8t^2cx^4 + 8t^2dx^6 + 8t^2cdx^8 \right] e^{-2tx^2} dx \tag{5.17}
\end{aligned}$$

$$= \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{t^{\frac{1}{2}}}{1} - \frac{c}{2t^{\frac{1}{2}}} + \frac{7c^2 - 18d}{16t^{\frac{3}{2}}} + \frac{21cd}{32t^{\frac{5}{2}}} + \frac{225d^2}{256t^{\frac{7}{2}}} \right). \tag{5.18}$$

Für die ungerade Funktion ($l = 1$) ergibt sich

$$\begin{aligned}
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[1 + 9c^2x^4 + 25d^2x^8 + 4t^2x^4 + 4t^2c^2x^8 + 4t^2d^2x^{12} \right. \\
&\quad 6cx^2 + 10dx^4 - 4tx^2 - 4tcx^4 - 4tdx^6 \\
&\quad + 30cdx^6 - 12tcx^4 - 12tc^2x^6 - 12tcdx^8 \\
&\quad - 20tdx^6 - 20tcdx^8 - 20td^2x^{10} \\
&\quad \left. \left(+8t^2cx^6 + 8t^2dx^8 + 8t^2cdx^{10} \right) \right] e^{-2tx^2} dx \tag{5.19}
\end{aligned}$$

$$= \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{3}{4t^{\frac{1}{2}}} + \frac{3c}{8t^{\frac{3}{2}}} + \frac{33c^2 - 30d}{64t^{\frac{5}{2}}} + \frac{165cd}{128t^{\frac{7}{2}}} + \frac{1995d^2}{1024t^{\frac{9}{2}}} \right). \tag{5.20}$$

5.1.3 Berechnung des Potentialterms

Analog zum vorherigen Potentialterm wird auch hier zunächst der Hilfstern

$$\langle \Psi | e^{mx} | \Psi \rangle \tag{5.21}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* e^{mx} \Psi dx \tag{5.22}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} ((x^l + cx^{2+l} + dx^{4+l})e^{-tx^2})^2 e^{mx} dx \tag{5.23}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} ((x^{2l} + (c^2 + 2d)x^{4+2l} + d^2x^{8+2l} + 2cx^{2+2l} + 2cdx^{6+2l})e^{-2tx^2}) e^{mx} dx \tag{5.24}$$

$$\tag{5.25}$$

zur späteren Auswertung des Potentialterms bestimmt.

Dann gilt für gerade Funktionen

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} (1 + 2cx^2 + (c^2 + 2d)x^4 + 2cdx^6 + d^2x^8)e^{-2tx^2} e^{mx} dx \tag{5.26}$$

und für ungerade Funktionen

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} (x^2 + 2cx^4 + (c^2 + 2d)x^6 + 2cdx^8 + d^2x^{10})e^{-2tx^2} e^{mx} dx. \tag{5.27}$$

Die einzelnen Summanden können getrennt voneinander berechnet werden. Es wird zunächst der einfachste Fall

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^0 e^{-2tx^2} e^{mx} dx \quad (5.28)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2tx^2+mx} dx \quad (5.29)$$

$$= e^{\frac{m^2}{8t}} \sqrt{\frac{\pi}{2t}} \quad (5.30)$$

berechnet. Für die Fälle, dass sich vor der Gaußfunktion noch ein Polynom befindet, kann der Term nach m differenziert werden gemäß

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} x^n e^{-2tx^2} e^{mx} dx \quad (5.31)$$

$$= \frac{d^n}{dm^n} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2tx^2} e^{mx} dx. \quad (5.32)$$

So können durch einfache Differentiationen die weiteren Terme für x^n aus dem Fall x^0 berechnet werden. Diese Differentiationen sind wieder unkompliziert aber länglich und werden deshalb nicht komplett vorgestellt. Beispielhaft wird die Berechnung für x^1 und x^2 durchgeführt. Für x^1 gilt

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-2tx^2} e^{mx} dx \quad (5.33)$$

$$= \frac{d}{dm} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} x^0 e^{-2tx^2} e^{mx} dx \right) \quad (5.34)$$

$$= \frac{d}{dm} \left(e^{\frac{m^2}{8t}} \sqrt{\frac{\pi}{2t}} \right) \quad (5.35)$$

$$= \frac{m}{4t} e^{\frac{m^2}{8t}} \sqrt{\frac{\pi}{2t}} \quad (5.36)$$

und für x^2 ergibt sich

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2tx^2} e^{mx} dx \quad (5.37)$$

$$= \frac{d^2}{dm^2} \left(e^{\frac{m^2}{8t}} \sqrt{\frac{\pi}{2t}} \right) \quad (5.38)$$

$$= \left(\frac{1}{4t} + \frac{m^2}{16t^2} \right) e^{\frac{m^2}{8t}} \sqrt{\frac{\pi}{2t}}. \quad (5.39)$$

Es zeigt sich für alle Fälle, in denen die Potenz von x gerade ist, dass

$$\langle \Psi | e^{mx} | \Psi \rangle = \langle \Psi | e^{-mx} | \Psi \rangle \quad (5.40)$$

gilt. Da in den Gleichungen (5.26) und (5.27) nur diese Fälle vorkommen, kann diese Eigenschaft genutzt werden. Mit diesen Gleichungen können nun für die gerade Ausgangsfunktion

die Terme

$$\langle \Psi | e^{4x} | \Psi \rangle \quad (5.41)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(1 + 2cx^2 + (c^2 + 2d)x^4 + 2cdx^6 + d^2x^8 \right) e^{-2tx^2} e^{4x} dx \quad (5.42)$$

$$= e^{\frac{2}{t}} \sqrt{\frac{\pi}{2t}} \left[1 + 2c \left(\frac{1}{4t} + \frac{1}{t^2} \right) + (c^2 + 2d) \left(\frac{3}{16t^2} + \frac{3}{2t^3} + \frac{1}{t^4} \right) \right. \\ \left. 2cd \left(\frac{15}{64t^3} + \frac{45}{16t^4} + \frac{15}{4t^5} + \frac{1}{t^6} \right) + d^2 \left(\frac{105}{256t^4} + \frac{105}{16t^5} + \frac{105}{8t^6} + \frac{7}{t^7} + \frac{1}{t^8} \right) \right] \quad (5.43)$$

und

$$\langle \Psi | e^{2x} | \Psi \rangle \quad (5.44)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(1 + 2cx^2 + (c^2 + 2d)x^4 + 2cdx^6 + d^2x^8 \right) e^{-2tx^2} e^{2x} dx \quad (5.45)$$

$$= e^{\frac{1}{2t}} \sqrt{\frac{\pi}{2t}} \left[1 + 2c \left(\frac{1}{4t} + \frac{1}{4t^2} \right) + (c^2 + 2d) \left(\frac{3}{16t^2} + \frac{3}{8t^3} + \frac{1}{16t^4} \right) \right. \\ \left. 2cd \left(\frac{15}{64t^3} + \frac{45}{64t^4} + \frac{15}{64t^5} + \frac{1}{64t^6} \right) + d^2 \left(\frac{105}{256t^4} + \frac{105}{64t^5} + \frac{105}{128t^6} + \frac{7}{64t^7} + \frac{1}{256t^8} \right) \right] \quad (5.46)$$

berechnet werden.

Damit wird der Potentialterm der geraden Ausgangsfunktion bestimmt, dieser ergibt sich gemäß

$$\langle \Psi | (n+1)^2 [s \cosh(2x) - 1]^2 | \Psi \rangle \quad (\text{analog zur ersten Testfunktion}) \\ = 2(n+1)^2 \langle \Psi | \left[\frac{s^2}{4} e^{4x} - s e^{2x} \right] | \Psi \rangle + (n+1)^2 \left(\frac{s^2}{2} + 1 \right) \langle \Psi | \Psi \rangle \quad (5.47) \\ = 2(n+1)^2 \left[\frac{s^2}{4} e^{\frac{2}{t}} \sqrt{\frac{\pi}{2t}} \left[1 + 2c \left(\frac{1}{4t} + \frac{1}{t^2} \right) + (c^2 + 2d) \left(\frac{3}{16t^2} + \frac{3}{2t^3} + \frac{1}{t^4} \right) \right. \right. \\ \left. \left. 2cd \left(\frac{15}{64t^3} + \frac{45}{16t^4} + \frac{15}{4t^5} + \frac{1}{t^6} \right) + d^2 \left(\frac{105}{256t^4} + \frac{105}{16t^5} + \frac{105}{8t^6} + \frac{7}{t^7} + \frac{1}{t^8} \right) \right] \right. \\ \left. - s e^{\frac{1}{2t}} \sqrt{\frac{\pi}{2t}} \left[1 + 2c \left(\frac{1}{4t} + \frac{1}{4t^2} \right) + (c^2 + 2d) \left(\frac{3}{16t^2} + \frac{3}{8t^3} + \frac{1}{16t^4} \right) \right. \right. \\ \left. \left. 2cd \left(\frac{15}{64t^3} + \frac{45}{64t^4} + \frac{15}{64t^5} + \frac{1}{64t^6} \right) + d^2 \left(\frac{105}{256t^4} + \frac{105}{64t^5} + \frac{105}{128t^6} + \frac{7}{64t^7} + \frac{1}{256t^8} \right) \right] \right] \\ + (n+1)^2 \left(\frac{s^2}{2} + 1 \right) \langle \Psi | \Psi \rangle \quad (5.48)$$

Durch Einsetzen der Gleichungen kann nun die Energie für den Grundzustand bestimmt werden, zunächst soll aber noch der Potentialterm der ungeraden Funktion bestimmt werden.

Dafür werden erneut die Hilfsternme

$$\begin{aligned}
& \langle \Psi | e^{4x} | \Psi \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(x^2 + 2cx^4 + (c^2 + 2d)x^6 + 2cdx^8 + d^2x^{10} \right) e^{-2tx^2} e^{4x} dx \\
&= e^{\frac{2}{t}} \sqrt{\frac{\pi}{2t}} \left[\left(\frac{1}{4t} + \frac{1}{t^2} \right) + 2c \left(\frac{3}{16t^2} + \frac{3}{2t^3} + \frac{1}{t^4} \right) \right. \\
&\quad \left. (c^2 + 2d) \left(\frac{15}{64t^3} + \frac{45}{16t^4} + \frac{15}{4t^5} + \frac{1}{t^6} \right) + 2cd \left(\frac{105}{256t^4} + \frac{105}{16t^5} + \frac{105}{8t^6} + \frac{7}{t^7} + \frac{1}{t^8} \right) \right. \\
&\quad \left. d^2 \left(\frac{945}{1024t^5} + \frac{4725}{256t^6} + \frac{1575}{32t^7} + \frac{315}{8t^8} + \frac{45}{4t^9} + \frac{1}{t^{10}} \right) \right]
\end{aligned} \tag{5.49}$$

und

$$\begin{aligned}
& \langle \Psi | e^{2x} | \Psi \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(x^2 + 2cx^4 + (c^2 + 2d)x^6 + 2cdx^8 + d^2x^{10} \right) e^{-2tx^2} e^{2x} dx \\
&= e^{\frac{1}{2t}} \sqrt{\frac{\pi}{2t}} \left[\left(\frac{1}{4t} + \frac{1}{4t^2} \right) + 2c \left(\frac{3}{16t^2} + \frac{3}{8t^3} + \frac{1}{16t^4} \right) \right. \\
&\quad \left. (c^2 + 2d) \left(\frac{15}{64t^3} + \frac{45}{64t^4} + \frac{15}{64t^5} + \frac{1}{64t^6} \right) + 2cd \left(\frac{105}{256t^4} + \frac{105}{64t^5} + \frac{105}{128t^6} + \frac{7}{64t^7} + \frac{1}{256t^8} \right) \right. \\
&\quad \left. d^2 \left(\frac{945}{1024t^5} + \frac{4725}{1024t^6} + \frac{1575}{512t^7} + \frac{315}{512t^8} + \frac{45}{1024t^9} + \frac{1}{1024t^{10}} \right) \right]
\end{aligned} \tag{5.51}$$

bestimmt. Damit gilt für den Potentialterm bei ungerader Ausgangsfunktion analog zum vorherigen Vorgehen

$$\begin{aligned}
& \langle \Psi | v(x) | \Psi \rangle \\
&= 2(n+1)^2 \left[s^2 e^{\frac{2}{t}} \sqrt{\frac{\pi}{2t}} \left[\left(\frac{1}{4t} + \frac{1}{t^2} \right) + 2c \left(\frac{3}{16t^2} + \frac{3}{2t^3} + \frac{1}{t^4} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. (c^2 + 2d) \left(\frac{15}{64t^3} + \frac{45}{16t^4} + \frac{15}{4t^5} + \frac{1}{t^6} \right) + 2cd \left(\frac{105}{256t^4} + \frac{105}{16t^5} + \frac{105}{8t^6} + \frac{7}{t^7} + \frac{1}{t^8} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. d^2 \left(\frac{945}{1024t^5} + \frac{4725}{256t^6} + \frac{1575}{32t^7} + \frac{315}{8t^8} + \frac{45}{4t^9} + \frac{1}{t^{10}} \right) \right] \right. \\
&\quad \left. - s e^{\frac{1}{2t}} \sqrt{\frac{\pi}{2t}} \left[\left(\frac{1}{4t} + \frac{1}{4t^2} \right) + 2c \left(\frac{3}{16t^2} + \frac{3}{8t^3} + \frac{1}{16t^4} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. (c^2 + 2d) \left(\frac{15}{64t^3} + \frac{45}{64t^4} + \frac{15}{64t^5} + \frac{1}{64t^6} \right) + 2cd \left(\frac{105}{256t^4} + \frac{105}{64t^5} + \frac{105}{128t^6} + \frac{7}{64t^7} + \frac{1}{256t^8} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. d^2 \left(\frac{945}{1024t^5} + \frac{4725}{1024t^6} + \frac{1575}{512t^7} + \frac{315}{512t^8} + \frac{45}{1024t^9} + \frac{1}{1024t^{10}} \right) \right] \right] + (n+1)^2 \left(\frac{s^2}{2} + 1 \right).
\end{aligned} \tag{5.53}$$

5.1.4 Energie des Grundzustandes

Um nun die Energie

$$E(c, d, t) = \frac{\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \tag{5.54}$$

zu erhalten, werden die oben bestimmten Ausdrücke für den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand in die Gleichung eingesetzt.

Für die Energie des Grundzustandes werden die Terme (5.8), (5.18) und (5.48) in die Gleichung eingesetzt. Die Form dieser Gleichung ist relativ kompliziert. Deshalb wird versucht, die Gleichung in eine einfachere Form zu bringen. Dazu werden Zähler und Nenner mit t^8 erweitert und der Faktor $\sqrt{\frac{\pi}{2t}}$ wird gekürzt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit geschieht dies alles noch getrennt für die Summanden im Zähler und im Nenner.

Der letzte Teil des Potentialterms kürzt sich schon beim Einsetzen mit dem Nenner und tritt damit als einfacher Summand in der Energie auf. Dieser Summand lautet für die gerade und die ungerade Funktion $(n+1)^2(\frac{s^2}{2}+1)$ und ist vom Kürzen nicht betroffen.

Mit den oben beschriebenen Erweiterungen ergibt sich für den Nenner:

$$N_g = t^8 + \frac{ct^7}{2} + (c^2 + 2d)\frac{3t^6}{16} + cd\frac{15t^5}{32} + d^2\frac{105t^4}{256}, \quad (5.55)$$

für den Impulsterm

$$I_g = t^9 - \frac{ct^8}{2} + (7c^2 - 18d)\frac{t^7}{16} + \frac{21cdt^6}{32} + \frac{225d^2t^5}{256} \quad (5.56)$$

und für den Potentialterm

$$\begin{aligned} P_g = 2(n+1)^2 & \left[\frac{s^2}{4} e^{\frac{2}{t}} \left[t^8 + 2c \left(\frac{t^7}{4} + t^6 \right) + (c^2 + 2d) \left(\frac{3t^6}{16} + \frac{3t^5}{2} + t^4 \right) \right. \right. \\ & \left. \left. + 2cd \left(\frac{15t^5}{64} + \frac{45t^4}{16} + \frac{15t^3}{4} + t^2 \right) + d^2 \left(\frac{105t^4}{256} + \frac{105t^3}{16} + \frac{105t^2}{8} + 7t + 1 \right) \right] \right. \\ & \left. - s e^{\frac{1}{2t}} \left[t^8 + 2c \left(\frac{t^7}{4} + \frac{t^6}{4} \right) + (c^2 + 2d) \left(\frac{3t^6}{16} + \frac{3t^5}{8} + \frac{t^4}{16} \right) \right. \right. \\ & \left. \left. + 2cd \left(\frac{15t^5}{64} + \frac{45t^4}{64} + \frac{15t^3}{64} + \frac{t^2}{64} \right) + d^2 \left(\frac{105t^4}{256} + \frac{105t^3}{64} + \frac{105t^2}{128} + \frac{7t}{64} + \frac{1}{256} \right) \right] \right]. \end{aligned} \quad (5.57)$$

Diese werden dann in den Energieterm gemäß

$$E(c, d, t) = \frac{P_g + I_g}{N_g} + (n+1)^2 \left(\frac{s^2}{2} + 1 \right) \quad (5.58)$$

eingesetzt. Von diesem Ausdruck wird nun das Minimum gesucht. Das Bilden der drei Ableitungen nach den jeweiligen Variablen würde den Term nochmal wesentlich verlängern und noch unübersichtlicher machen, deshalb wird zu Minimierung ein anderer Weg gewählt. Anstatt nach Stellen zu suchen, bei denen die Ableitung 0 wird, wird versucht die Variablen so zu variieren, dass der Ausdruck selbst minimal wird. Zuerst wird dabei die Energie für feste Werte des Streckungsparameters t gegen die Variablen c und d geplottet. Der Streckungsparameter t wird sukzessiv von 0 bis 5 erhöht und es wird untersucht, wo sich Minima der Energie finden. Für alle getesteten Werte von t hat das globale Minimum den Parameterwert $d = 0$. Die Testfunktion liefert damit für $d = 0$ die besten Werte, deshalb wird diese Vereinfachung

in die Testfunktion übernommen. Für die Energie findet sich dann mit $d = 0$ der Ausdruck

$$E_{s,n}(t, c) = \frac{t^9 - \frac{ct^8}{2} + 7c^2 \frac{t^7}{16} + 2(n+1)^2 \left(\frac{s^2}{4} e^{\frac{2}{i}} \left(t^8 + 2c \left(\frac{t^7}{4} + t^6 \right) + c^2 \left(\frac{3t^6}{16} + \frac{3t^5}{2} + t^4 \right) \right) \right)}{t^8 + \frac{ct^7}{2} + c^2 \frac{3t^6}{16}} + 2(n+1)^2 \frac{-s e^{\frac{1}{2i}} \left(t^8 + 2c \left(\frac{t^7}{4} + \frac{t^6}{4} \right) + c^2 \left(\frac{3t^6}{16} + \frac{3t^5}{8} + \frac{t^4}{16} \right) \right)}{t^8 + \frac{ct^7}{2} + c^2 \frac{3t^6}{16}} + (n+1)^2 \left(\frac{s^2}{2} + 1 \right). \quad (5.59)$$

Dieser kann noch vereinfacht werden durch Kürzen mit t^4 und erweitern mit 16, dies liefert dann den Ausdruck

$$E_{s,n}(t, c) = \frac{16t^5 - 8ct^4 + 7c^2t^3 + 2(n+1)^2 \left[\frac{s^2}{4} e^{\frac{2}{i}} (16t^4 + 2c(4t^3 + 16t^2) + c^2 3t^2 + 24t + 16) \right]}{16t^4 + 8ct^3 + c^2 3t^2} + 2(n+1)^2 \frac{-s e^{\frac{1}{2i}} (16t^4 + 8c(t^3 + t^2) + c^2(3t^2 + 6t + 1))}{16t^4 + 8ct^3 + c^2 3t^2} + (n+1)^2 \left(\frac{s^2}{2} + 1 \right). \quad (5.60)$$

Bevor nun das Minimum dieser Energie bestimmt wird, wird die Energie des ersten angeregten Zustandes berechnet.

5.1.5 Energie des ersten angeregten Zustandes

Für die Energie des ersten angeregten Zustandes werden analog die Terme 5.11, 5.20 und 5.53 in den Term der Energie eingesetzt. Für diesen Teil wird ebenfalls der Parameter $d = 0$ gewählt. Die Ausdrücke für die Energie können ansonsten zu schlecht überblickt werden. Es sei hier kurz erwähnt, dass der Parameter d hier nur aus Gründen der Übersichtlichkeit und Einfachheit auf null gesetzt wird. Dass der Parameter d im Grundzustand auf 0 gesetzt wurde, liegt daran, dass die Energieobergrenze durch den zusätzlichen Parameter nicht weiter sinkt und somit keine besseren Ergebnisse erzielt werden. Bessere Ergebnisse im ersten angeregten Zustand sind durch Variation des Parameters d durchaus möglich, werden aber hier nicht weiter betrachtet. Für den Fall der ungeraden Testfunktion soll zunächst der Quotient aus Impulsterm und Nenner bestimmt werden und anschließend der Quotient aus Potentialterm und Nenner. Für ersteren ergibt sich

$$\frac{\sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{3}{4t^{\frac{1}{2}}} + \frac{3c}{8t^{\frac{3}{2}}} + \frac{33c^2 - 30d}{64t^{\frac{5}{2}}} + \frac{165cd}{128t^{\frac{7}{2}}} + \frac{1995d^2}{1024t^{\frac{9}{2}}} \right)}{\sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{1}{4t^{\frac{3}{2}}} + \frac{3c}{8t^{\frac{5}{2}}} + \frac{(15c^2 + 2d)}{64t^{\frac{7}{2}}} + \frac{105cd}{128t^{\frac{9}{2}}} + \frac{945d^2}{1024t^{\frac{11}{2}}} \right)} \quad d = 0 \quad (5.61)$$

$$= \frac{\left(\frac{3}{4t^{\frac{1}{2}}} + \frac{3c}{8t^{\frac{3}{2}}} + \frac{33c^2}{64t^{\frac{5}{2}}} \right)}{\left(\frac{1}{4t^{\frac{3}{2}}} + \frac{3c}{8t^{\frac{5}{2}}} + \frac{15c^2}{64t^{\frac{7}{2}}} \right)} \quad (5.62)$$

$$= \frac{(48t^3 + 24ct^2 + 33c^2t)}{(16t^2 + 24ct + 15c^2)}. \quad (5.63)$$

Für den Quotienten aus Potentialterm und Normierung werden Zähler und Nenner getrennt aufgeschrieben, um die Gleichungen übersichtlich zu halten. Damit ergibt sich

$$\frac{P_u'}{N_u'} + (n+1)^2 \left(\frac{s^2}{2} + 1 \right) \quad \text{mit} \quad (5.64)$$

$$\begin{aligned} P_u' = & 2(n+1)^2 \left[s^2 e^{\frac{2}{t}} \sqrt{\frac{\pi}{2t}} \left[\left(\frac{1}{4t} + \frac{1}{t^2} \right) + 2c \left(\frac{3}{16t^2} + \frac{3}{2t^3} + \frac{1}{t^4} \right) \right. \right. \\ & (c^2 + 2d) \left(\frac{15}{64t^3} + \frac{45}{16t^4} + \frac{15}{4t^5} + \frac{1}{t^6} \right) + 2cd \left(\frac{105}{256t^4} + \frac{105}{16t^5} + \frac{105}{8t^6} + \frac{7}{t^7} + \frac{1}{t^8} \right) \\ & \left. \left. d^2 \left(\frac{945}{1024t^5} + \frac{4725}{256t^6} + \frac{1575}{32t^7} + \frac{315}{8t^8} + \frac{45}{4t^9} + \frac{1}{t^{10}} \right) \right] \right. \\ & - s e^{\frac{1}{2t}} \sqrt{\frac{\pi}{2t}} \left[\left(\frac{1}{4t} + \frac{1}{4t^2} \right) + 2c \left(\frac{3}{16t^2} + \frac{3}{8t^3} + \frac{1}{16t^4} \right) \right. \\ & (c^2 + 2d) \left(\frac{15}{64t^3} + \frac{45}{64t^4} + \frac{15}{64t^5} + \frac{1}{64t^6} \right) + 2cd \left(\frac{105}{256t^4} + \frac{105}{64t^5} + \frac{105}{128t^6} + \frac{7}{64t^7} + \frac{1}{256t^8} \right) \\ & \left. \left. d^2 \left(\frac{945}{1024t^5} + \frac{4725}{1024t^6} + \frac{1575}{512t^7} + \frac{315}{512t^8} + \frac{45}{1024t^9} + \frac{1}{1024t^{10}} \right) \right] \right] \end{aligned} \quad (5.65)$$

$$N_u' = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{1}{4t^{\frac{3}{2}}} + \frac{3c}{8t^{\frac{5}{2}}} + \frac{15(c^2 + 2d)}{64t^{\frac{7}{2}}} + \frac{105cd}{128t^{\frac{9}{2}}} + \frac{945d^2}{1024t^{\frac{11}{2}}} \right). \quad (5.66)$$

Einsetzen des Parameters $d = 0$, Kürzen von $\sqrt{\frac{\pi}{2t}}$ und erweitern mit $128t^6$ liefert die finale Form der Energie für den ersten angeregten Zustand

$$\begin{aligned} E_{s,n}(c, t) = & \frac{\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{(48t^3 + 24ct^2 + 33c^2t)}{(16t^2 + 24ct + 15c^2)} + \frac{P}{N} + (n+1)^2 \left(\frac{s^2}{2} + 1 \right) \\ & \text{mit} \\ P = & (n+1)^2 \left[s^2 e^{\frac{2}{t}} \left((16t^5 + 64t^4) + c(24t^4 + 192t^3 + 128t^2) \right. \right. \\ & \left. \left. c^2(15t^3 + 180t^2 + 240t + 64) \right) \right. \\ & \left. - s e^{\frac{1}{2t}} \left((64t^5 + 64t^4) + c(96t^4 + 192t^3 + 32t^2) \right. \right. \\ & \left. \left. c^2(60t^3 + 180t^2 + 60t + 4) \right) \right] \\ & \text{und} \\ N = & (16t^2 + 24ct + 15c^2) 2t^3. \end{aligned} \quad (5.67)$$

5.2 Minimierung der Energie

Die gefundenen Ausdrücke für die Energie sind wie bereits erwähnt zwar unkompliziert, aber sehr länglich. Das Differenzieren dieser Terme würde die Terme selbst nur unübersichtlicher machen, weshalb wie oben bereits kurz beschrieben eine andere Methode genutzt wird.

Da von den jeweiligen Termen für die verschiedenen Werte von s und n jeweils nur das globale Minimum interessant ist, wird versucht, von einem passenden Startwert beginnend durch Variation der Variablen das Minimum zu finden.

Dazu wird die Energie zunächst für feste Werte von n und s gegen die Variablen c und t geplottet. So können Startwerte für die Suche nach den Minima gefunden werden. Dann werden von diesem Startwert ausgehend die Variablen c und t so verändert, dass die Energie immer kleiner wird. Dies geschieht so lange, bis im Rahmen der einfachen Maschinengenauigkeit (single precision) keine Optimierung mehr möglich ist. Dieses Verfahren wird umgangssprachlich als Bergsteigeralgorithmus bezeichnet. Der entsprechende Programmcode findet sich auf der beigelegten CD.

Damit konnte eine Minimierung der Energiefunktion ohne Berechnung der Ableitungen geschehen. Eine Tabelle mit Werten findet sich im Anhang.

5.3 Vergleich mit den exakten Energien

Die nun gefundenen oberen Schranken für die Eigenenergie der Zustände sollen nun wieder analog zur vorherigen Testfunktion mit den exakten Eigenenergien verglichen werden, dazu werden wieder für die Werte $n = 1, 2, 3, 4$ die Energiedifferenzen gegen den Parameter s aufgetragen. Die Energiedifferenzen für den Grundzustand finden sich in der Abbildung 19 und die für den ersten angeregten Zustand in der Abbildung 20.

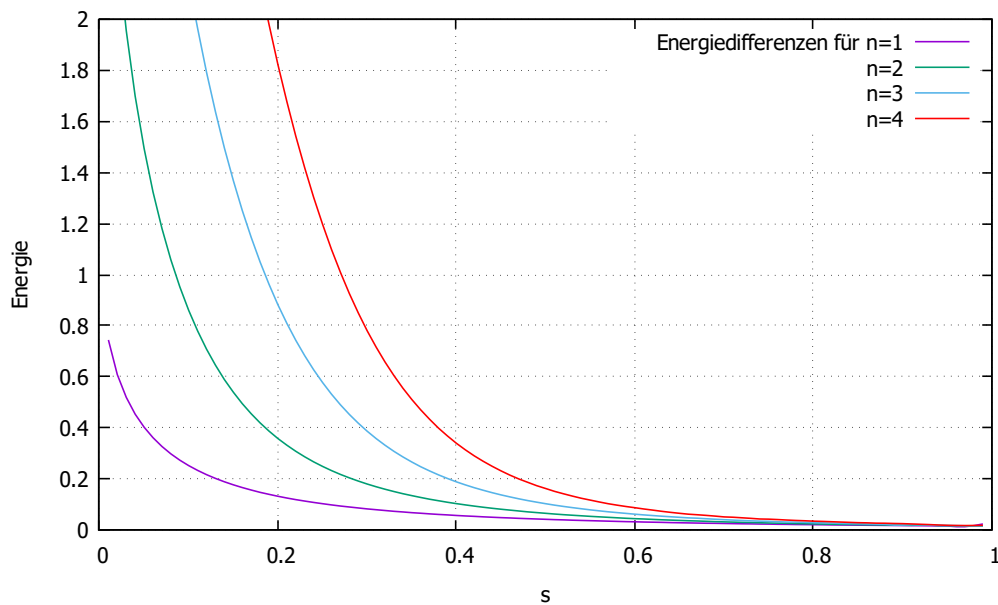


Abbildung 19: Energiedifferenzen zwischen der Testfunktion und der exakten Eigenenergie für den Grundzustand gegen den Parameter s für verschiedene Werte von n und Energiedifferenz eines lokalen Minimums für $n=1$

Wie auch schon bei der ersten Testfunktion fällt auf, dass sich die Energiedifferenzen für verschiedene n nur quantitativ, aber nicht qualitativ unterscheiden. Außerdem fällt die Energiedifferenz für kleine s in beiden Fällen sehr groß aus, die Ergebnisse für große s sind in beiden Fällen wieder recht gut. Um die Fehlerquellen der geraden und ungeraden Testfunktion zu finden, werden wieder die Testfunktionen mit den exakten Funktionen verglichen.

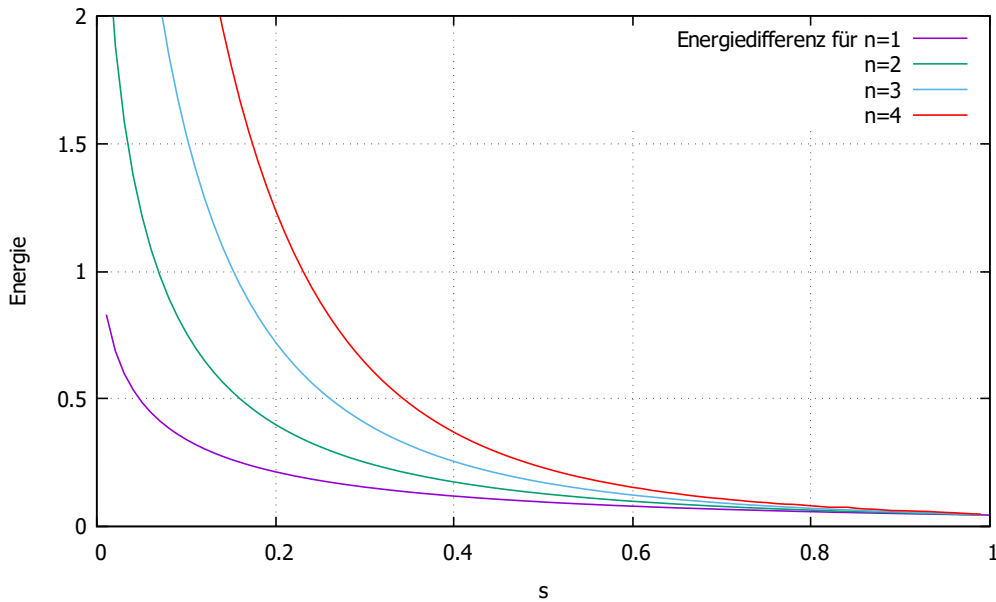


Abbildung 20: Energiedifferenzen zwischen der Testfunktion und der exakten Eigenenergie für den ersten angeregten Zustand gegen den Parameter s für verschiedene Werte von n

5.4 Vergleich mit den exakten Wellenfunktionen

Der Vergleich mit den exakten Funktionen kann Fehler der Testfunktion sichtbar machen. Da die Verläufe für verschiedene Werte von n wieder sehr ähnlich sind, werden wieder repräsentativ die Funktionen für $n=1$ und zwei Werte von s verglichen. Der Vergleich für den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand für $s = 0,85$ ist in Abbildung 21 dargestellt. Die Funktionen stimmen wie zu erwarten sehr gut überein. Sowohl für den Grundzustand als auch für den ersten angeregten Zustand wird die geringe Energiedifferenz der Funktionen durch die hohe Übereinstimmung der Funktionsverläufe bestätigt.

Betrachtet man hingegen Parameterwerte von s , für die die Energiedifferenz höher ist, spiegelt sich diese Differenz auch in den Funktionsverläufen wider. Für den Parameterwert $s = 0,02$ ist der Grundzustand in der Abbildung 22 und für den ersten angeregten Zustand in der Abbildung 23 aufgetragen.

In diesen Abbildungen zeigt sich auch der Grund der Energiedifferenz. Die Testfunktion kann für den Grundzustand den Verlauf der exakten Wellenfunktion nicht gut wiedergeben. Die Testfunktion ist zu sehr um die Mitte zentriert und kann die Maxima außen nicht gut reproduzieren, würde man die Maxima der Testfunktion weiter nach außen schieben, so kann der starke Abfall der Funktion nach Erreichen der Maxima nicht reproduziert werden. Die Diskrepanzen zwischen Testfunktion und exakter Wellenfunktion ähneln dabei den Unterschieden zwischen der exakten Wellenfunktion und der ersten Testfunktion aus zwei verschobenen Gaußkurven.

Ähnlich fällt auch die Betrachtung des ersten angeregten Zustandes aus, die Testfunktion kann die weit außen befindlichen Maxima und den schnellen Abfall der Funktion danach nicht wiedergeben.

Der Verlauf der Variablen c und t liefert wenige Erkenntnisse. Ungeachtet einiger Artefakte haben die Variablen c und t für verschiedenen Werte von n und unabhängig von Grundzustand

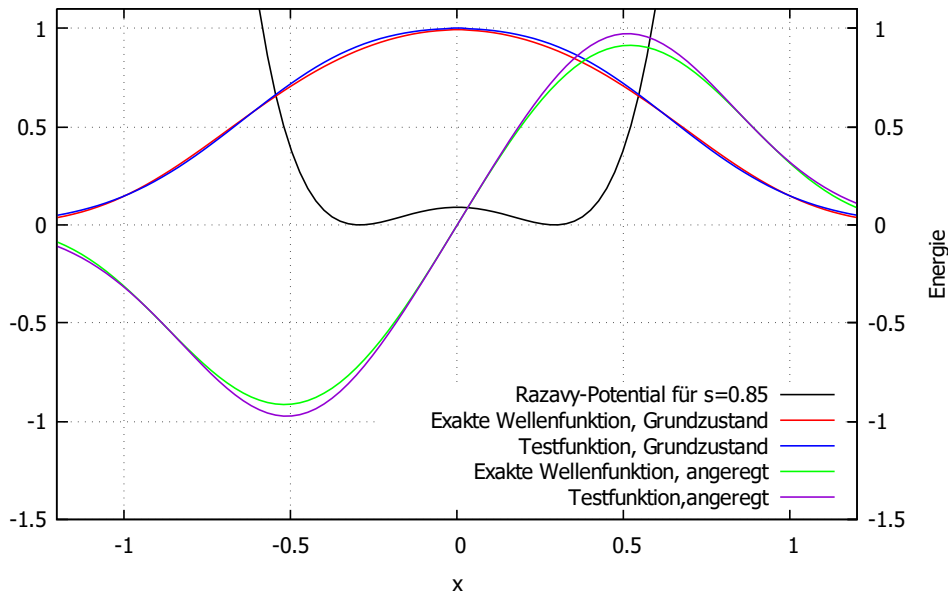


Abbildung 21: Razavy-Potential, Testfunktion und exakte Wellenfunktion für den Grundzustand und Testfunktion und exakte Wellenfunktion für den ersten angeregten Zustand gegen x für $s = 0,85$, Potential rechte Ordinatenaachse, Wellenfunktionen linke Ordinatenaachse

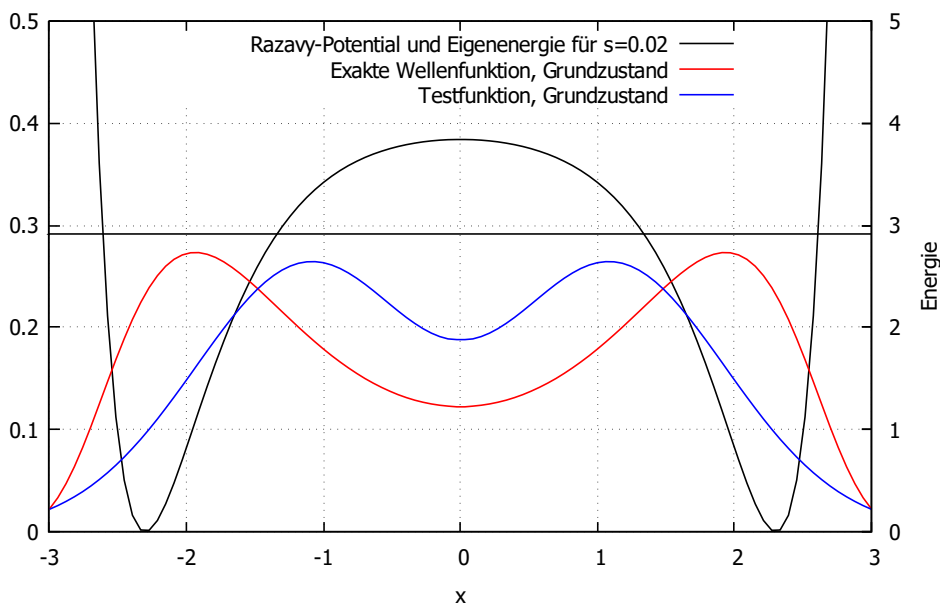


Abbildung 22: Razavy-Potential und exakte Eigenenergie, Testfunktion und exakte Wellenfunktion für den Grundzustand für $s = 0,02$; Potential und Energie rechte Ordinatenaachse, Wellenfunktionen linke Ordinatenaachse

oder angeregtem Zustand den gleichen Verlauf. Die angesprochenen Artefakte treten zum Beispiel für $n=4$ und $s < 0,2$ auf, da aber in diesem Fall die Energiedifferenz erheblich ist, wird auch kaum eine Übereinstimmung der Funktionen erwartet, auf eine Analyse dieser Teile

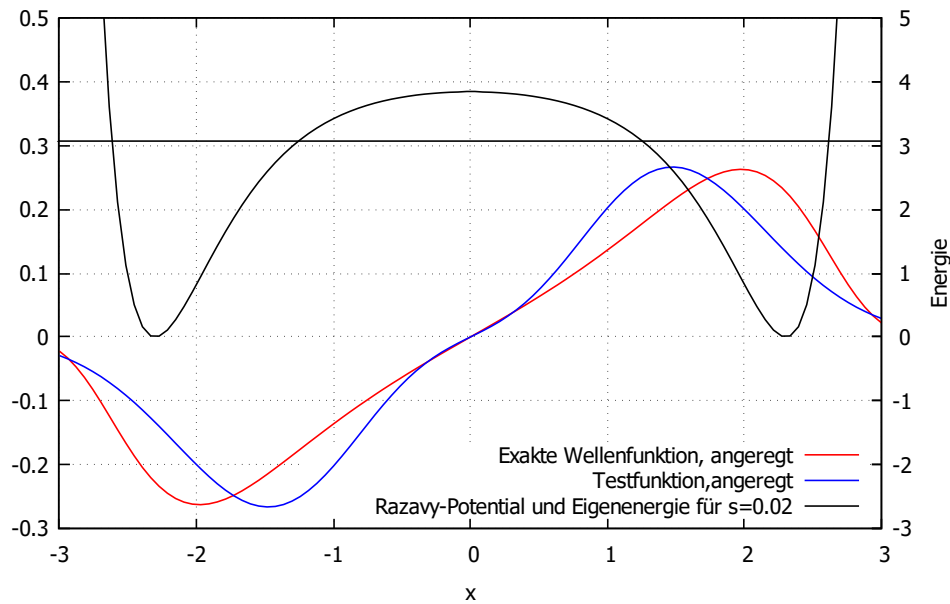


Abbildung 23: Razavy-Potential und exakte Eigenenergie, Testfunktion und exakte Wellenfunktion für den ersten angeregten Zustand gegen x für $s = 0,02$; Potential und Energie rechte Ordinatenachse, Wellenfunktionen linke Ordinatenachse

soll deshalb verzichtet werden. Beispielhaft ist der Verlauf der Variablen c und t für $n = 1$ und $n = 2$ im Grundzustand in der Abbildung 24 dargestellt.

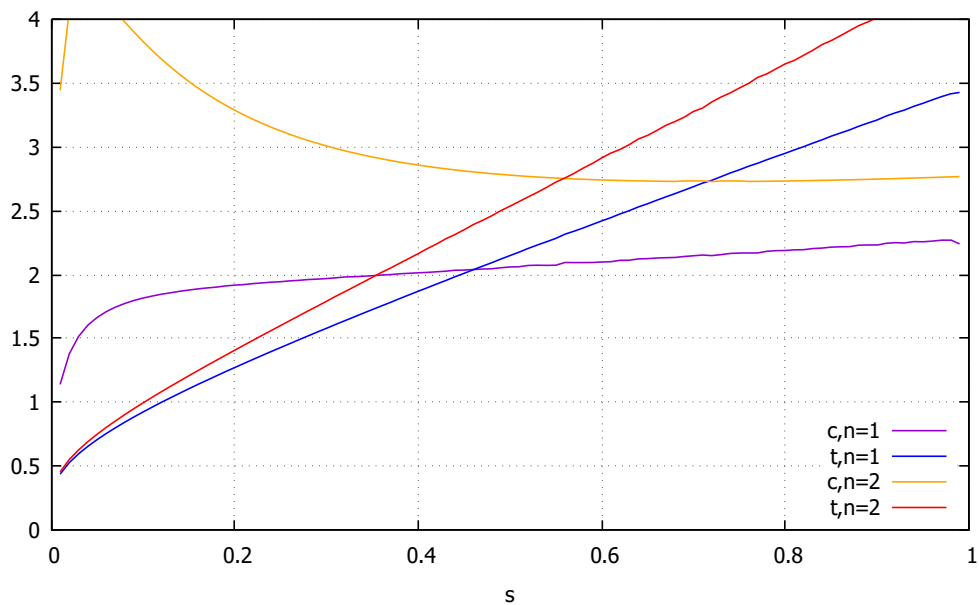


Abbildung 24: Verlauf der Variablen c und t gegen den Potentialparameter s für $n=1$ und $n=2$ im Grundzustand

Es lässt sich gut erkennen, dass der Streckungsparameter t mit steigendem s steigt. Bezogen auf die Funktion bedeutet das, dass die Gaußkurve stärker abfällt, je größer s wird. Dies entspricht ebenfalls den Erwartungen. Der Verlauf und Einfluss des Parameter c ist nicht ganz so offensichtlich. Durch seinen Einfluss auf x^2 liefert ein großer Wert von c eine Steigung der Funktion nahe der Stelle $x = 0$ in beide Richtungen. Ist der Wert des Parameter c größer als der des Parameters t , so steigt die Funktion nahe $x = 0$ in beide Richtungen und es liegt ein lokales Minimum vor. Falls t aber größer ist als c , liegt ein lokales Maximum vor.

Auf die Abbildung 24 bezogen bedeutet das, dass der Parameterwert s , für den die Testfunktion ein lokales Minimum im Zentrum und zwei weitere lokale Maxima erzeugt, einfach abgelesen werden kann. An der Stelle, an der sich c und t kreuzen, wechselt die Funktion bei $x = 0$ von einem Minimum zu einem Maximum. Dies kann mit einem Vorzeichenwechsel der zweiten Ableitung an der Stelle $x = 0$ bestimmt werden.

Ebenfalls zeigt sich, dass dieser Wechsel für größere n auch bei größeren s geschieht. Dies bestätigen die Parameterwerte für $n = 3$ und $n = 4$, die aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht abgebildet wurden.

Die Testfunktion wechselt damit früher in eine Gestalt mit einem lokalen Minimum und zwei lokalen Maxima als die exakte Funktion. Dieser Wechsel geschieht bei der Testfunktion bei $s \approx 0,46$ und bei der exakten Funktion bei $s = 0,25$. Der frühere Wechsel passiert, da die Testfunktion ansonsten der Breite der exakten Funktion nicht folgen könnte.

Zusammenfassend bleibt die Erkenntnis, dass die Funktion für große s sehr viel bessere Ergebnisse liefert als für kleine s . Der Effekt ist hierbei noch deutlicher als bei der Testfunktion aus zwei verschobenen Gaußkurven.

6 Vergleich der Testfunktionen

Nun sollen noch die Ergebnisse der beiden Testfunktionen verglichen werden.

Da ab diesem Zeitpunkt der Begriff Testfunktion nicht mehr eindeutig durch das Kapitel vorgegeben ist, wird die Testfunktion, die aus zwei verschobenen Gaußkurven besteht HO-Testfunktion genannt, da diese Testfunktion dem Grundzustand zweier verschobener harmonischer Oszillatoren gleicht. Die Funktion, die sich aus dem Produkt eines Polynoms und einer Gaußkurve ergibt, werde als Polynom-Testfunktion bezeichnet. Die HO-Testfunktion soll nicht mit der Eigenfunktion des harmonischen Oszillators aus der Näherung des Potentials verwechselt werden.

Das ausschlaggebende Kriterium zum Vergleich ist die Energiedifferenz. Beide Funktionen liefern für große Werte von s gute Ergebnisse. Nun soll noch bestimmt werden, welche Funktion die besseren Ergebnisse erzielt. Für kleine Werte des Parameters s ist offensichtlich, dass die HO-Testfunktion wesentlich bessere Ergebnisse erzielt als die Polynom-Testfunktion. Interessant ist damit vor allem der Bereich $s > 0,4$. Für diesen Bereich werden nun für $n = 1$ und $n = 2$ repräsentativ die Energiedifferenzen für den Grundzustand in der Abbildung 25 und für den ersten angeregten Zustand in der Abbildung 26 aufgetragen.

Der Abbildung 25 kann entnommen werden, dass sich die Energiedifferenzen der beiden Funktionen im Grundzustand für $s > 0,4$ nur sehr unwesentlich voneinander unterscheiden. Die HO-Testfunktion liefert für alle s und für alle n bessere Werte, jedoch ist vor allem für $s > 0,8$ die Differenz zwischen den Energien der Testfunktionen wesentlich kleiner als die Differenz

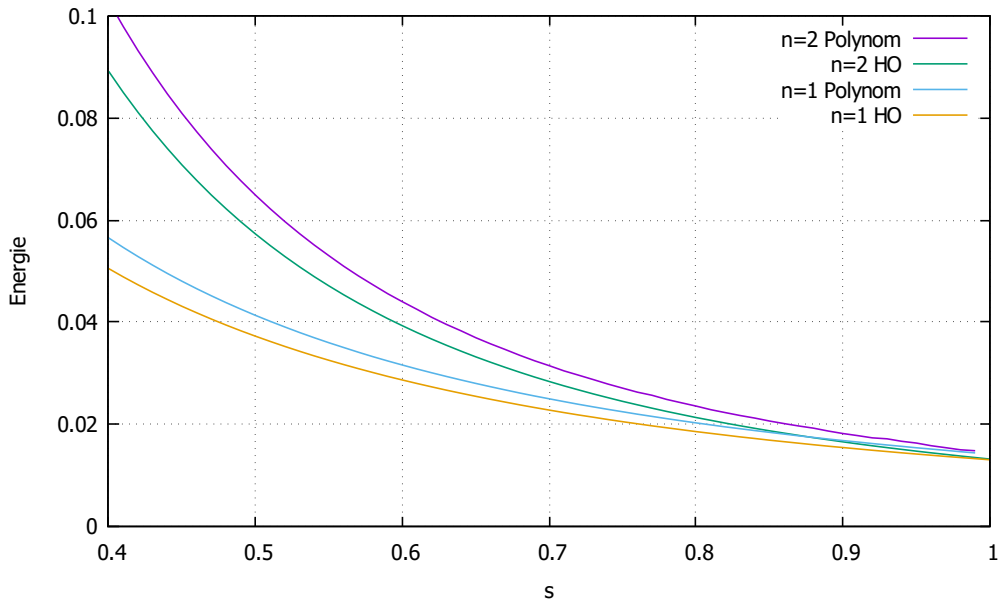


Abbildung 25: Energiedifferenz zur exakten Energie für die Testfunktion aus zwei verschobenen Gaußkurven (HO) und der Testfunktion aus Produkt aus Polynom und Gaußfunktion (Polynom) im Grundzustand gegen s

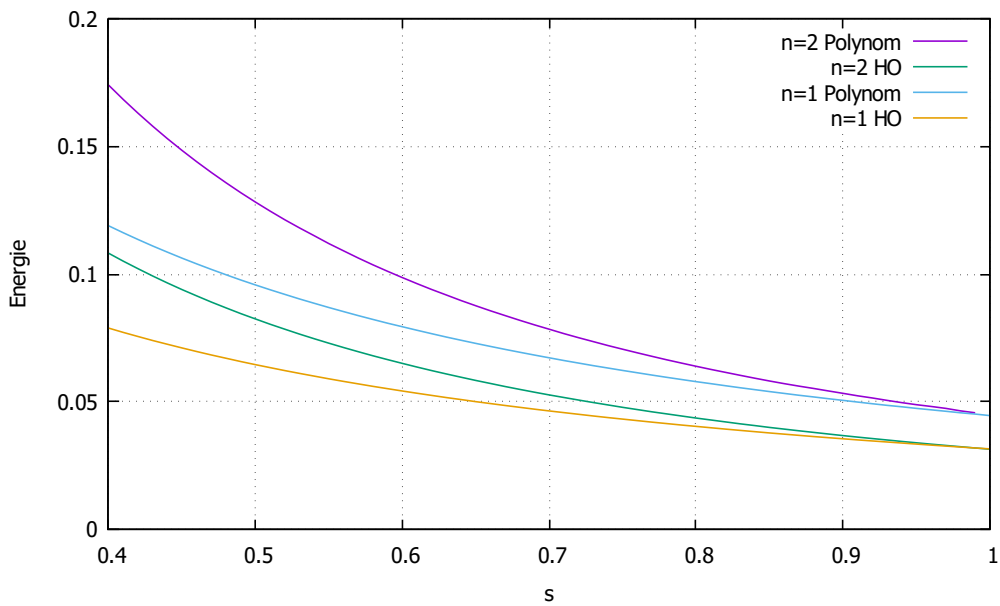


Abbildung 26: Energiedifferenz zur exakten Energie für die Testfunktion aus zwei verschobenen Gaußkurven (HO) und der Testfunktion aus Produkt aus Polynom und Gaußfunktion (Polynom) für den ersten angeregten Zustand gegen s

zum exakten Wert.

Im Bereich der kleinen Werte von s liefert die Polynom-Testfunktion wesentlich schlechtere

Werte, diese Werte eignen sich kaum für eine Aussage über eine Energieobergrenze, während die HO-Testfunktion durchaus akzeptable Ergebnisse liefert. Für den ersten angeregten Zustand liefert die HO-Testfunktion auch für große s deutlich bessere Werte. Die Differenz zwischen den Energien der Testfunktionen ist deutlich größer als im Grundzustand. Bemerkenswert ist, dass die Energiedifferenzen für den ersten angeregten Zustand für $s \rightarrow 1$ kaum noch von n abhängig sind. Dies gilt auch für $n = 3$ und $n = 4$. Beide Testfunktionen liefern zwar verschiedene Energiedifferenzen, diese sind aber unabhängig von einer Skalierung des Potentials. Das Potential hat für $s = 1$ nur eine einfache Mulde und steigt so stark an, dass eine Skalierung mit dem quadratischen Term $(n + 1)^2$ nur sehr schwachen Einfluss auf die Funktionen und Energien hat.

Damit schneidet im Vergleich die HO-Testfunktion besser ab, der wesentliche Unterschied liegt dabei in den Bereichen kleiner s , also stärkeren Ausprägungen der Doppelmuldengestalt.

Ein wesentlich unwichtigeres Vergleichskriterium als die Differenz zur exakten Eigenenergie ist die Einfachheit der Rechnungen. Für alle Näherungsverfahren ist auch immer der Rechenaufwand interessant. Der Aufwand für die beiden Testfunktionen kann nicht völlig trivial verglichen werden, da die Polynom-Testfunktion anfangs von drei Parameter abhängt, während die HO-Testfunktion nur von zwei Parametern abhängt.

Trotzdem bleibt auch für zwei Parameter der Rechenaufwand der Polynom-Testfunktion etwas größer. Die Bestimmung der Energie der HO-Testfunktion mag an manchen Stellen unwesentlich komplizierter sein, ist dafür aber deutlich kürzer. Hier sei noch erwähnt, dass die Einschätzung des Rechenaufwandes subjektiv ist und deshalb nur bedingt aussagekräftig ist.

Die HO-Testfunktion ist damit als Näherungsfunktion für das Razavy-Potential besser geeignet als die Polynom-Testfunktion.

7 Zusammenfassung und Fazit

Zum Schluss soll die Arbeit zusammengefasst werden und ein Fazit gezogen werden.

Die Umskalierung des Potentials dient der Übersichtlichkeit der Gleichungen, hat aber keinen physikalischen Hintergrund. Es zeigt sich, dass der Parameter s durch seinen strukturbildenden Einfluss auch starken Einfluss auf die Ergebnisse der Berechnungen hat. Der Parameter n hat aufgrund der skalierenden Eigenschaft nur quantitativen, keinen qualitativen Einfluss.

Danach wird die HO-Testfunktion untersucht, die Berechnung der Energie der HO-Testfunktion kann analytisch geschehen. Bei der Bestimmung des Minimums treten transzendente Gleichungen auf, die nicht exakt gelöst werden können. Deshalb wird das inexakte Newtonverfahren genutzt, um die jeweiligen Minima zu bestimmen. Die so gefundenen Energieeigenwerte und Wellenfunktionen stimmen gut mit den exakten Werten überein. Überraschend ist die hohe Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Zentrum. Die Wellenfunktion zentriert sich stärker um die Mitte als es erwartet wurde. Auch für sehr stark getrennte Mulden ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Zentrum nicht vernachlässigbar.

Der Versuch, das Potential durch zwei verschobene harmonische Oszillatoren zu nähern, ist nicht gelungen. Die Mulden des Potentials sind deutlich zu asymmetrisch.

Aufgrund der Erkenntnisse durch die erste Testfunktion wird als zweite Testfunktion ein Pro-

dukt aus Polynom und Gaußkurve gewählt. Die Berechnung der Energie ist für den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand wieder exakt möglich. Die Minima werden wieder numerisch bestimmt. Es hat sich gezeigt, dass zumindest für den Grundzustand ein dritter Parameter in der gewählten Form keine besseren Ergebnisse liefert. Ansonsten stimmen die Ergebnisse der Polynom-Testfunktion für nicht zu starke Ausprägungen der Doppelmulden-gestalt mit den Ergebnissen der HO-Testfunktion überein und liefern gute Werte. Für stark getrennte Mulden liefert die Polynom-Testfunktion erwartungsgemäß keine guten Werte.

Der Vergleich der Funktionen zeigt, dass die HO-Testfunktionen bei etwas weniger Rechenaufwand bessere Ergebnisse liefert. Um die Ergebnisse vor allem für starke Ausprägungen der Doppelmuldengestalt noch zu verbessern, könnte die HO-Testfunktion noch um einen weiteren Teil erweitert werden. Im Grundzustand würde sich eine zusätzliche um $x = 0$ zentrierte Gaußfunktion anbieten, sodass die hohe Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Zentrum besser wiedergegeben werden kann. So könnte die Asymmetrie der Mulden auch von der Testfunktion berücksichtigt werden. Für den ersten angeregten Zustand sind die Energiedifferenzen auch bei starker Trennung der Mulden noch recht gut. Eine Option zur Verbesserung wäre in diesem Fall die Multiplikation mit einem geraden Polynom, jedoch würde dies den Rechenaufwand erheblich erhöhen. Bei beiden neuen Testfunktion könnten große Teile der Rechnung übernommen werden. Eine Verbesserung der HO-Testfunktion ist einer Verbesserung der Polynom-Testfunktion vorzuziehen, da letztere bei mehr Rechenaufwand schlechtere Ergebnisse liefert.

Schlussendlich kann gesagt werden, dass das Variationsverfahren für das Razavy-Potential akzeptable Werte liefert. Die starke Asymmetrie der Mulden führt aber dazu, dass auch die Maxima der exakten Wellenfunktionen asymmetrisch sind. Dies kann von beiden Testfunktionen nicht optimal reproduziert werden. Damit wird deutlich, wie wichtig eine geschickte Wahl der Testfunktion für den Erfolg des Variationsverfahrens ist.

Literatur

- [1] Chih-Kai Lin, Huan-Cheng Chang, , and S. Lin. Symmetric double-well potential model and its application to vibronic spectra. *The Journal of Physical Chemistry A*, 111(38):9347–9354, 2007. PMID: 17725334.
- [2] G. J. Milburn, J. Corney, E. M. Wright, and D. F. Walls. Quantum dynamics of an atomic bose-einstein condensate in a double-well potential. *Phys. Rev. A*, 55:4318–4324, Jun 1997.
- [3] M. Razavy. An exactly soluble schrödinger equation with a bistable potential. *American Journal of Physics*, 48(4):285–288, 1980.
- [4] G. Münster. *Quantentheorie*. De Gruyter Studium. de Gruyter, 2010.
- [5] M. Moriconi. Nodes of wavefunctions. *American Journal of Physics*, 75(3):284–285, 2007.
- [6] Winnie Clara Poel. *Energieaufspaltung im Razavy-Potential*. WWU Münster, Bachelorarbeit, 2011.

Zur Erstellung der Graphen wurde das Programm
Gnuplot Version 5.0 Patchlevel 1 verwendet.

Zur Kontrolle einiger Rechnungen wurde das Programm
Wolfram Mathematica 10.1 genutzt.

Diese Fassung der Arbeit unterscheidet sich nur geringfügig von der Version, die dem Prüfungsamt vorgelegt wurde.

A Tabellarische Übersicht der Energien

Im Anhang soll noch eine tabellarische Übersicht der exakten Eigenenergien und der Eigenenergien der Testfunktionen gegeben werden.

Die Testfunktion aus zwei verschobenen Gaußkurven wird HO-Testfunktion genannt, die Funktion aus Produkt aus Polynom und Gaußkurve wird Polynom-Testfunktion genannt.

A.1 Energiewerte für $n=1$

s	Grundzustand			erster angeregter Zustand		
	HO	Polynom	Exakt	HO	Polynom	Exakt
0,05	3,1515	3,2123	2,81	3,4864	3,6961	3,21
0,1	2,8550	2,8916	2,64	3,6430	3,7795	3,44
0,15	2,6423	2,6664	2,49	3,8516	3,9525	3,69
0,2	2,4747	2,4917	2,36	4,0944	4,1736	3,96
0,25	2,3400	2,3525	2,25	4,3648	4,4294	4,25
0,3	2,2326	2,2422	2,16	4,6599	4,7141	4,56
0,35	2,1500	2,1575	2,09	4,9782	5,0895	4,89
0,4	2,0905	2,0965	2,04	5,3188	5,3589	5,24
0,45	2,0531	2,0580	2,01	5,6810	5,7162	5,61
0,5	2,0373	2,0413	2,00	6,0645	6,0957	6,00
0,55	2,0425	2,0460	2,01	6,4690	6,4969	6,41
0,6	2,0687	2,0716	2,04	6,8942	6,9193	6,84
0,65	2,1154	2,1180	2,09	7,3400	7,3628	7,29
0,7	2,1823	2,1850	2,16	7,8064	7,8272	7,76
0,75	2,2705	2,2725	2,25	8,2932	8,3122	8,25
0,8	2,3786	2,3803	2,36	8,8003	8,8179	8,76
0,85	2,6070	2,5084	2,49	9,3278	9,3440	9,29
0,9	2,6555	2,6568	2,64	9,8755	9,8905	9,84
0,95	2,8242	2,8254	2,81	10,4434	10,4574	10,41

A.2 Energiewerte für $n=2$

s	Grundzustand			erster angeregter Zustand		
	HO	Polynom	Exakt	HO	Polynom	Exakt
0,05	5,4513	6,4284	4,93	5,45239	6,23689	5,02
0,10	5,3433	5,6176	4,76	5,436 68	5,845 16	5,09
0,15	4,9254	5,0509	4,51	5,474 97	5,733 55	5,20
0,20	4,5229	4,5937	4,24	5,578 07	5,758 30	5,36
0,25	4,1621	4,2056	3,96	5,740 85	5,874 00	5,56
0,30	3,8430	3,8714	3,69	5,958 67	6,061 08	5,81
0,35	3,5653	3,5847	3,45	6,228 43	6,309 59	6,10
0,40	3,3292	3,3429	3,24	6,548 13	6,613 99	6,44
0,45	3,1348	3,1449	3,06	6,916 42	6,970 90	6,82
0,50	2,9827	2,9903	2,93	7,332 38	7,378 17	7,25
0,55	2,8732	2,8791	2,83	7,795 39	7,834 41	7,72
0,60	2,8067	2,8114	2,77	8,304 98	8,338 60	8,24
0,65	2,7834	2,7871	2,75	8,860 82	8,890 07	8,80
0,70	2,8036	2,8067	2,78	9,462 66	9,488 38	9,41
0,75	2,8674	2,8700	2,84	10,1103	10,1331	10,1
0,80	2,9752	2,9775	2,95	10,8036	10,8239	10,8
0,85	3,1270	3,1289	3,11	11,5424	11,5606	11,5
0,90	3,3229	3,3246	3,31	12,3267	12,3433	12,3
0,95	3,5631	3,5647	3,55	13,1564	13,1713	13,1

A.3 Energiewerte für $n=3$

s	Grundzustand			erster angeregter Zustand		
	HO	Polynom	Exakt	HO	Polynom	Exakt
0,05	7,4603	10,5121	6,9739	7,4603	9,5817	6,9858
0,1	7,4118	9,0271	6,8729	7,4139	8,4914	6,964
0,15	7,3053	8,0412	6,6729	7,3518	7,9768	6,96
0,2	6,9594	7,2557	6,3739	7,315	7,7115	6,9918
0,25	6,4261	6,5772	6,00	7,3345	7,6033	7,0718
0,3	5,8875	5,9722	5,5858	7,4227	7,6139	7,2085
0,35	5,3793	5,4298	5,164	7,5841	7,7253	7,4078
0,4	4,9164	4,9482	4,76	7,8205	7,9279	7,6737
0,45	4,508	4,5288	4,3918	8,133	8,2167	8,0094
0,5	4,16	4,1742	4,0718	8,522	8,5888	8,417
0,55	3,8769	3,887	3,8085	8,9883	9,0426	8,898
0,6	3,6618	3,6693	3,6078	9,532	9,5767	9,4538
0,65	3,5172	3,5228	3,4737	10,1535	10,1909	10,0852
0,7	3,4449	3,4493	3,4094	10,8532	10,8848	10,793
0,75	3,4464	3,4505	3,417	11,6311	11,6584	11,5778
0,8	3,5227	3,5261	3,498	12,4875	12,511	12,44
0,85	3,6747	3,6776	3,6538	13,4227	13,4433	13,38
0,9	3,9031	3,9062	3,8852	14,4366	14,4549	14,3981
0,95	4,2085	4,2103	4,193	15,5295	15,5457	15,4946

A.4 Energiewerte für $n=4$

s	Grundzustand			erster angeregter Zustand		
	HO	Polynom	Exakt	HO	Polynom	Exakt
0,05	9,4637	15,4781	8,9784	9,4637	13,8308	8,9797
0,1	9,4104	13,0322	8,9055	9,4104	11,7308	8,9254
0,15	9,3186	11,5017	8,7587	9,3217	10,6576	8,8543
0,2	9,1677	10,3335	8,5109	9,2097	10,0237	8,7889
0,25	8,8324	9,3426	8,1457	9,1091	9,6293	8,7523
0,3	8,2066	8,4522	7,672	9,0584	9,4057	8,7647
0,35	7,5035	7,6334	7,1223	9,0824	9,3234	8,843
0,4	6,8081	6,8809	6,5415	9,1954	9,3682	9
0,45	6,157	6,2	5,969	9,4063	9,5339	9,2458
0,5	5,5721	5,5992	5,4372	9,7211	9,8178	9,5881
0,55	5,0684	5,0861	4,9696	10,1437	10,2188	10,0325
0,6	4,6566	4,6694	4,5825	10,6774	10,7366	10,5836
0,65	4,3442	4,3524	4,2876	11,3246	11,373	11,2447
0,7	4,1369	4,1435	4,0927	12,0872	12,1272	12,0185
0,75	4,0388	4,0458	4,0036	12,9665	13,0003	12,907
0,8	4,053	4,0589	4,0246	13,964	13,9929	13,912
0,85	4,182	4,1869	4,1587	15,0804	15,1059	15,0347
0,9	4,4276	4,4326	4,4083	16,3168	16,3381	16,2763
0,95	4,7913	4,793	4,775	17,6736	17,6924	17,6376

Plagiatserklärung der / des Studierenden

Hiermit versichere ich, dass die vorliegende Arbeit über „Vergleich von Variationsverfahren und exakten Ergebnissen für das Razavy-Potenzial“ 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 Zweck vorzunehmenden Speicherung der Arbeit in einer Datenbank einverstanden.

(Datum, Unterschrift)