



Bachelorarbeit

Analytische und numerische Untersuchungen quasi-exakt lösbarer Potentiale

Analytical and numerical investigations of quasi-exact solvable potentials

Alexander Fulst

24.06.2014

Institut für Theoretische Physik
der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster

Themensteller: Prof. Dr. Gernot Münster
Zweitgutachter: Prof. Dr. Nikos Doltsinis

Diese Fassung der Arbeit unterscheidet sich nur geringfügig von der am 24. Juni 2014 dem Prüfungsamt vorgelegten Version.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theoretische Grundlagen	2
2.1	Numerische Lösung der Schrödingergleichung mit dem Numerov-Algorithmus	2
2.1.1	Rekursive Berechnung der Wellenfunktionen	2
2.1.2	Lösungsverfahren	3
2.2	Analytische Untersuchung des Razavy-Potentials	5
2.2.1	Umskalierung und Anpassung an das Programm	5
2.2.2	Analytische Bestimmung der Energieeigenwerte ϵ	7
3	Implementierung	12
3.1	Das Numerov-Programm	12
3.2	Das Newton-Raphson-Programm	14
4	Evaluation	15
4.1	Verifizierung des Programms	15
4.1.1	Harmonischer Oszillator	15
4.1.2	Modifiziertes Pöschl-Teller-Potential	17
4.2	Analytische und numerische Lösung des Razavy-Potentials	20
4.2.1	Energieaufspaltung für $\tilde{n} = 5$	20
4.2.2	Energieaufspaltung für $\tilde{n} = 6$	24
4.2.3	Energieaufspaltung für $\tilde{n} = 7$	28
4.3	Vergleich der numerischen Lösung mit der semiklassischen Näherung . . .	30
5	Zusammenfassung	35
	Literaturverzeichnis	37

Symbolverzeichnis

β	Parameter des Razavy-Potentials, wird für die Berechnungen auf $\sqrt{2}$ gesetzt
ϵ_n	n-ter umskalierter Energieeigenwert
F_i	$F(x_i) = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x_i))$
h	Schrittweite des Numerov-Algorithmus
\hbar	das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum, wird auf 1 gesetzt
m	Masse des Teilchens, wird auf 1 gesetzt
n	Hauptquantenzahl (bei 0 beginnend)
\tilde{n}	Parameter des Razavy-Potentials
\mathbb{N}	Menge der natürlichen Zahlen ohne 0
\mathbb{N}_0	Menge der natürlichen Zahlen mit 0
Ψ_i	der Wert der Wellenfunktion an der Stelle x_i
s	Parameter des umskalierten Razavy-Potentials

1 Einleitung

Quasi-exakt lösbare Potentiale stellen eine interessante Art von Potentialen in der Quantenmechanik dar, da sie nur eine begrenzte Anzahl von analytisch berechenbaren Eigenenergien besitzen. Mit numerischen Methoden ist hingegen eine Berechnung von beliebig vielen Energieeigenwerten möglich. Dabei haben die quasi-exakt lösbaren Potentiale den großen Vorteil gegenüber Potentialen, die ausschließlich numerisch untersucht werden können, dass analytische Werte zur Verfügung stehen, um die Qualität der numerischen Lösung abschätzen zu können. Weiterhin können entsprechende Parameter so angepasst werden, dass die numerische und analytische Lösungen übereinstimmen. Damit sollten auch die nur numerisch berechenbaren Werte sehr genau werden. Eines der wenigen quasi-exakt lösbaren Potentiale ist das Razavy-Potential, welches 1980 von M. Razavy zum ersten Mal in [Raz80] untersucht wurde und auch hier behandelt werden soll. Es handelt sich hierbei um ein Doppelmuldenpotential, welches aus zwei hyperbolischen Kosinus-Funktionen zusammengesetzt ist.

Damit gehört das Razavy-Potential zu einer weiteren interessanten Gruppe von Potentialen, da Doppelmuldenpotentiale einige besondere charakteristische Eigenschaften besitzen. Sie eignen sich beispielsweise zur einfachen Modellierung von Molekülen oder Zweiteilchen-Problemen. In dieser Arbeit soll ein besonderes Augenmerk auf die Aufspaltung von Energieniveaus in Abhängigkeit einiger Parameter des Potentials gelegt werden. Ist die Aufspaltung klein genug, so ist ein Übergang durch den Tunneleffekt möglich. Beim Ammoniak-Molekül bildet dieser Übergang beispielsweise die Grundlage für den Ammoniakmaser (vgl. [Mün10]).

Diese Arbeit baut auf den Ergebnissen aus [Pap11] und [Kem12] zur numerischen Lösung der stationären Schrödingergleichung sowie den Ergebnissen aus [Poe11] und [Kün14] zur analytischen Untersuchung des Razavy-Potentials auf. Es werden zunächst die theoretischen Grundlagen aus beiden Bereichen erläutert, bevor die Erkenntnisse aus beiden Teilen zusammengeführt werden. Zunächst wird dann die Qualität des numerischen Lösungsverfahrens untersucht. Dieses soll anschließend zur Berechnung der Energieeigenwerte genutzt werden, welche sich nicht mehr analytisch berechnen lassen. So kann ermittelt werden, ob sich deren Verhalten von dem im analytisch lösbaren Teil unterscheidet. Zum Schluss wird noch die semiklassische Näherung der Energieaufspaltung der unteren beiden Eigenenergien mit den numerischen Ergebnissen verglichen.

2 Theoretische Grundlagen

Zunächst soll das Numerov-Verfahren, welches zur numerischen Berechnung der Eigenenergien und der Wellenfunktionen genutzt wird, erläutert, anschließend das Razavy-Potential analytisch untersucht werden.

2.1 Numerische Lösung der Schrödingergleichung mit dem Numerov-Algorithmus

Das Numerov-Verfahren ist in seiner hier vorgestellten Ausführung zur Lösung der eindimensionalen stationären Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (2.1)$$

beliebiger symmetrischer Potentiale $V(x)$ mit $V(x) \geq 0 \forall x$ geeignet.

2.1.1 Rekursive Berechnung der Wellenfunktionen

Die folgende Herleitung der Rekursionsgleichung orientiert sich wie [Kem12] und [Pap11] an [Sch95]. Um eine numerische Lösung zu finden, wird Gleichung (2.1) in die Form

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) + F(x)\Psi(x) = 0 \quad (2.2)$$

gebracht, wobei $F(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))$ ist. Die numerische Berechnung kann natürlich nicht kontinuierlich erfolgen, weshalb x diskretisiert werden muss. Führt man dies mit konstanter Schrittweite h durch, so wird $x_i = i \cdot h, i \in \mathbb{Z}$. Die Berechnung der Wellenfunktion Ψ erfolgt damit nur an den Stützstellen $\Psi_i = \Psi(x_i)$. Die Taylorentwicklung von Ψ um den Punkt x_i ergibt sich zu

$$\Psi_{i\pm 1} = \Psi_i \pm h\Psi_i^{(1)} + \frac{h^2}{2}\Psi_i^{(2)} \pm \frac{h^3}{6}\Psi_i^{(3)} + \frac{h^4}{24}\Psi_i^{(4)} \pm \frac{h^5}{120}\Psi_i^{(5)} + \mathcal{O}(h^6), \quad (2.3)$$

mit der k -ten Ableitung $\Psi_i^{(k)}$ im Punkt x_i .

Addiert man nun die Gleichungen für $+$ und $-$, so fallen die ungeraden Terme heraus und es gilt:

$$\Psi_{i+1} + \Psi_{i-1} = 2\Psi_i + h^2\Psi_i^{(2)} + \frac{h^4}{12}\Psi_i^{(4)} + \mathcal{O}(h^6). \quad (2.4)$$

Hieraus folgt für die zweite Ableitung

$$h^2\Psi_i^{(2)} = \Psi_{i-1} + \Psi_{i+1} - 2\Psi_i + \mathcal{O}(h^4), \quad (2.5)$$

wobei hier die Terme ab $\mathcal{O}(h^4)$ vernachlässigt werden.

Zweimaliges Ableiten und Einsetzen von (2.2) führt dann auf den Ausdruck

$$h^2\Psi_i^{(4)} = -F_{i-1}\Psi_{i-1} + 2F_i\Psi_i - F_{i+1}\Psi_{i+1} + \mathcal{O}(h^4). \quad (2.6)$$

Schließlich liefert Einsetzen von (2.2) und (2.6) in (2.4) und Umformen nach Ψ_{i+1} die zweigliedrige Rekursion

$$\boxed{\Psi_{i+1} = \frac{2\Psi_i - \Psi_{i-1} - \frac{h^2}{12}(10F_i\Psi_i + F_{i-1}\Psi_{i-1})}{1 + \frac{h^2}{12}F_{i+1}} + \mathcal{O}(h^6)}. \quad (2.7)$$

2.1.2 Lösungsverfahren

Um Gleichung (2.7) anwenden zu können, muss eine Energie E vorgegeben werden. Außerdem werden zwei Anfangsbedingungen benötigt, um die Rekursion starten zu können. Die Eigenenergien der gebundenen Zustände werden mit $n \in \mathbb{N}_0$ durchnummeriert. Da hier symmetrische Potentiale betrachtet werden, müssen die Wellenfunktionen zu den Energieeigenwerten abwechselnd gerade und ungerade sein. Daraus folgt für ungerade n :

$\Psi_0 = 0$; für Ψ_1 kann ein beliebiger, von Null verschiedener, Wert gewählt werden.

Der Wert von Ψ_1 spielt lediglich für die Normierung der Wellenfunktion eine Rolle und kann für eine gute Darstellung auf h gesetzt werden.

Für gerade n folgt aus (2.7) für $i = 0$ mit $\Psi_{-1} = \Psi_1$ unter der Bedingung, dass die Wellenfunktionen ebenfalls gerade sind und $F_{-1} = F_1$ aus der Symmetrie des Potentials

$$\Psi_1 = \frac{1 - \frac{5h^2}{12}F_0}{1 + \frac{h^2}{12}F(h)}\Psi_0 + \mathcal{O}(h^6). \quad (2.8)$$

Ψ_0 kann einen beliebigen Wert annehmen und wird hier zu 1 gewählt. Diese Anfangsbedingungen finden sich ebenfalls in [Sch95].

Um nun zu überprüfen, ob die vorgegebene Energie zu einem Eigenzustand gehört,

wird das Verhalten der berechneten Wellenfunktion untersucht. Nach dem Knotensatz muss die Wellenfunktion zum n -ten Energieeigenwert genau n Nullstellen haben. Außerdem folgt aus der Bedingung der Normierbarkeit, dass die Wellenfunktion im Unendlichen gegen Null konvergieren muss. Hat die berechnete Wellenfunktion zu viele Nullstellen, so ist die angenommene Energie zu klein, wohingegen sie bei einer zu geringen Energie im Unendlichen divergiert oder zu wenig Nullstellen aufweist. Dadurch kann im nächsten Iterationsschritt eine angepasste Energie gewählt werden. Dies geschieht mittels einer Bisektion mit dem unteren Startwert $E_{min} = 0$. Der Startwert für die obere Grenze ergibt sich aus dem Verhalten des Potentials im Unendlichen. Konvergiert es gegen einen Wert $0 \leq V_\infty < \infty$, so wird $E_{max} = V_\infty$ gesetzt, da nur unterhalb dieses Wertes gebundene Zustände existieren können. Falls das Potential hingegen gegen unendlich strebt, so wird $E_{max} = 10^{200}$ gesetzt. Dieser Wert ist groß genug, um alle praktisch und theoretisch interessanten Zustände zu untersuchen und gerade klein genug, damit das Programm während der Berechnung nicht an die numerischen Grenzen stößt.

Die Energie wird zu $\frac{E_{max}+E_{min}}{2}$ gewählt und die Wellenfunktion berechnet. Anschließend wird entweder die obere oder die untere Energiegrenze auf diesen Wert gesetzt. Die Bisektion bricht ab, wenn

$$\frac{E_{max} - E_{min}}{E_{max} + E_{min}} \quad (2.9)$$

kleiner oder gleich der gewählten Genauigkeit ist. Nachdem ein Energiewert gefunden wurde, wird dieser zur Minimierung der Rechenzeit als neue untere Schranke gesetzt.

Neben dem hier gezeigten Schießverfahren gibt es noch weitere Methoden zur Lösung der stationären Schrödingergleichung. Diese werden in [Kem12] ausführlich untersucht und es werden auch Möglichkeiten aufgezeigt, um nichtsymmetrische Potentiale lösen zu können. Dabei ergeben sich jedoch weder in der Performance noch in der Genauigkeit nennenswerte Vorteile gegenüber dem hier genutzten Verfahren, weshalb darauf verzichtet wird, die Implementierung unnötig kompliziert zu gestalten.

2.2 Analytische Untersuchung des Razavy-Potentials

2.2.1 Umskalierung und Anpassung an das Programm

In [Raz80] stellt Razavy ein Potential der Form

$$V(x) = \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} \left[\frac{1}{8} \xi^2 \cosh(4\beta x) - (\tilde{n} + 1) \xi \cosh(2\beta x) - \frac{1}{8} \xi^2 \right] \quad (2.10)$$

vor, wobei ξ , β und $\tilde{n} \in \mathbb{N}$ Parameter sind. Mit der in [Poe11] verwendeten Umskalierung

$$V(x) = \frac{\beta^2}{2m} v(x) \quad (2.11)$$

$$E = \frac{\beta^2}{2m} \epsilon \quad (2.12)$$

$$s = \frac{\xi}{2(\tilde{n} + 1)} \quad (2.13)$$

$$\tilde{x} = \beta x \quad (2.14)$$

$$v(\tilde{x}) = \frac{1}{2} (\tilde{n} + 1)^2 \left[s^2 (\cosh(4\tilde{x}) - 1) - 4s \cosh(2\tilde{x}) \right] \quad (2.15)$$

lässt sich das Potential eleganter aufschreiben. Damit ein Doppelmuldenpotential vorliegt, muss der neue Parameter s laut [Poe11] einen Wert in dem Intervall $(0,1)$ aufweisen. Im Folgenden soll zunächst nur $v(\tilde{x})$ untersucht werden.

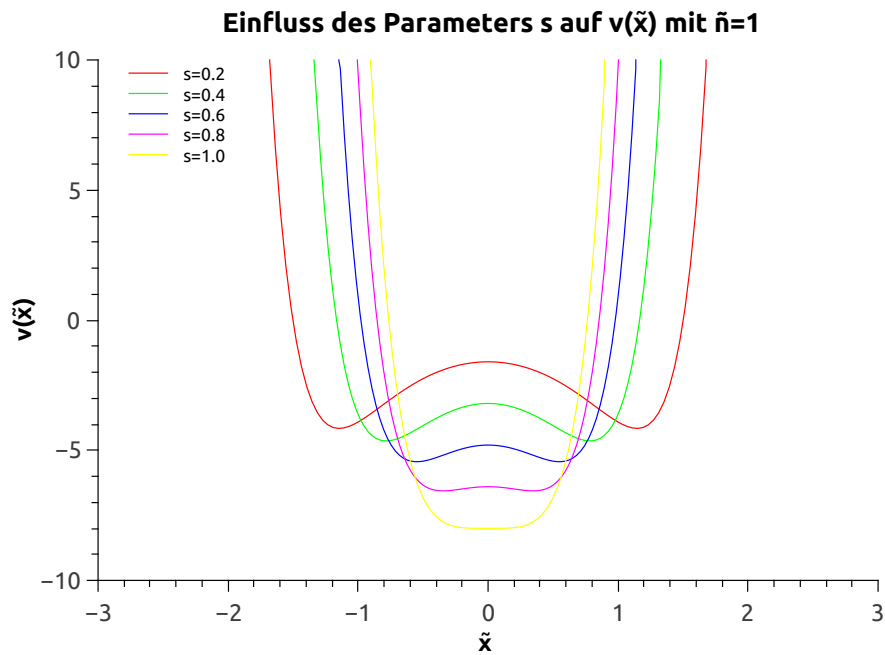


Abbildung 1 – Abhängigkeit des Potentials vom Parameter s

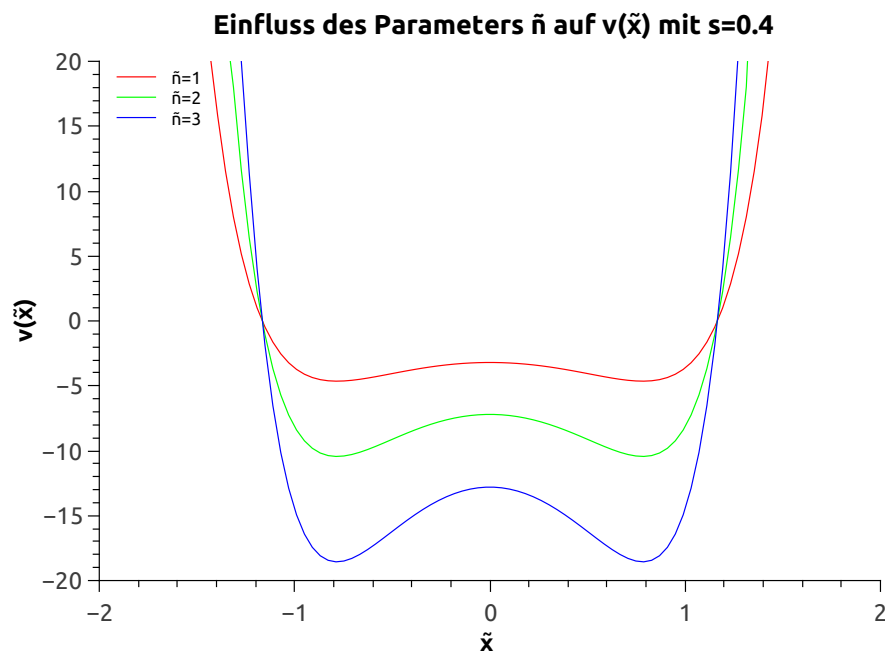


Abbildung 2 – Abhängigkeit des Potentials vom Parameter \tilde{n}

Es lässt sich erkennen, dass der Parameter s die Lage der Minima stark beeinflusst und

einen Einfluss auf die Höhe des Potentialsberges und die Tiefe der Minima hat. Außerdem zeigt sich, dass bei $s = 1$ keine Doppelmulde mehr vorliegt. Der Parameter \tilde{n} hingegen nimmt keinen Einfluss auf die Position der Minima entlang der Abszisse, dafür ist er maßgeblich für die Höhe des Potentialberges sowie die Tiefe der Minima verantwortlich. Weiterhin ist in Abbildung 1 zu erkennen, dass die Bedingung $v(x) \geq 0 \forall x$ aus Abschnitt 2.1 nicht erfüllt ist.

Um dieser Bedingung zu entsprechen, muss das Potential verschoben werden. Die Verschiebung ist dabei offensichtlich von s und \tilde{n} abhängig. In [Poe11] wird der Wert der Minima zu

$$-(\tilde{n} + 1)^2(s^2 + 1) \tag{2.16}$$

bestimmt. Addition von (2.16) und (2.15) liefert dann mit Umformung

$$v(\tilde{x}) = (\tilde{n} + 1)^2 [s \cosh(2\tilde{x}) - 1]^2 \tag{2.17}$$

In dieser Form lassen sich die Energieeigenwerte ϵ für $v(\tilde{x})$ mit dem entwickelten Programm finden. Für einen Vergleich von numerischer und analytischer Lösung gilt es zu beachten, dass die numerischen Werte für ϵ durch die Verschiebung des Potentials ebenfalls um $(\tilde{n} + 1)^2(s^2 + 1)$ nach oben verschoben sind.

2.2.2 Analytische Bestimmung der Energieeigenwerte ϵ

Die analytische Lösung der Eigenwerte findet sich bereits in [Raz80], vollständiger ist jedoch die Ausführung in [Poe11].

Als Ausgangspunkt für die quantenmechanische Rechnung dient die Schrödingergleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \Psi(\tilde{x}) + [\epsilon - v(\tilde{x})] \Psi(\tilde{x}) = 0, \tag{2.18}$$

mit dem nicht verschobenen Potential (2.15). Die Lösung dieser Differentialgleichung erfolgt in [Raz80] mit der Sommerfeldschen Polynommethode.

Betrachtet man den Grenzfall $x \rightarrow \pm\infty$, so wird die Differentialgleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \Psi_a(\tilde{x}) - [(\tilde{n} + 1)^2 s^2 \cosh(2\tilde{x}) - 2(\tilde{n} + 1)s \cosh(2\tilde{x}) - (\tilde{n} + 1)^2 s^2] \Psi_a(x) = 0, \tag{2.19}$$

welche die gleiche asymptotische Form wie Gleichung (2.18) hat, durch den für $x = \pm\infty$ verschwindenden Ausdruck

$$\Psi_a(\tilde{x}) = e^{-\frac{1}{2}(\tilde{n}+1)s \cosh(2\tilde{x})} \quad (2.20)$$

gelöst. Damit kann der Ansatz

$$\Psi(\tilde{x}) = e^{-\frac{1}{2}(\tilde{n}+1)s \cosh(2\tilde{x})} \Phi(\tilde{x}) \quad (2.21)$$

zur Lösung der ursprünglichen Differentialgleichung gewählt werden, sodass man durch Einsetzen eine neue Differentialgleichung für $\Phi(\tilde{x})$ erhält:

$$\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \Phi(\tilde{x}) = 2s(\tilde{n} + 1) \sinh(2\tilde{x}) \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \Phi(\tilde{x}) + [\epsilon + 2s\tilde{n}(\tilde{n} + 1) \cosh(2\tilde{x})] \Phi(\tilde{x}) \quad (2.22)$$

Diese Gleichung lässt sich durch einen Reihenansatz für $\Phi(\tilde{x})$ lösen, wobei nur die Lösungen betrachtet werden, welche sich als endliche Summe von hyperbolischen Sinus- bzw. Kosinusfunktionen von jx mit $j \in \mathbb{N}$ darstellen lassen.

$$\Phi(\tilde{x}) = \sum_{j=0}^k C_{2j+1} \cosh [(2j + 1)\tilde{x}] \quad (2.23)$$

$$\Phi(\tilde{x}) = \sum_{j=0}^k C_{2j} \cosh [2j\tilde{x}] \quad (2.24)$$

$$\Phi(\tilde{x}) = \sum_{j=0}^k S_{2j+1} \sinh [(2j + 1)\tilde{x}] \quad (2.25)$$

$$\Phi(\tilde{x}) = \sum_{j=0}^k S_{2j} \sinh [2j\tilde{x}] \quad (2.26)$$

Diese Ansätze lassen sich in die Differentialgleichung einsetzen, sodass sich Rekursionsrelationen für die Koeffizienten ergeben. Das Vorgehen gestaltet sich dabei für alle vier Ansätze analog, weshalb hier nur für (2.23) eine genauere Betrachtung erfolgen soll.

Einsetzen von (2.23) in (2.22) unter Ausnutzung der Beziehungen

$$2 \cosh(ax) \cosh(bx) = \cosh [(a + b)x] + \cosh [(a - b)x] \quad (2.27)$$

$$\text{und } 2 \sinh(ax) \sinh(bx) = \cosh [(a + b)x] - \cosh [(a - b)x] , \quad (2.28)$$

so gelangt man zu der Gleichung

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{j=0}^k C_{2j+1} [(2j + 1)^2 + \epsilon] \cosh [(2j + 1)\tilde{x}] \\ &+ \sum_{j=0}^k C_{2j+1} s(\tilde{n} + 1)(\tilde{n} - 2j - 1) \cosh [(2j + 3)\tilde{x}] \\ &+ \sum_{j=0}^k C_{2j+1} s(\tilde{n} + 1)(\tilde{n} + 2j + 1) \cosh [(2j - 1)\tilde{x}] , \end{aligned} \quad (2.29)$$

welche sich durch Verschiebung der zweiten und dritten Summe zu

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{j=0}^k C_{2j+1} [(2j + 1)^2 + \epsilon] \cosh [(2j + 1)\tilde{x}] \\ &+ \sum_{j=1}^{k+1} C_{2j-1} s(\tilde{n} + 1)(\tilde{n} - 2j + 1) \cosh [(2j + 1)\tilde{x}] \\ &+ \sum_{j=-1}^{k-1} C_{2j+3} s(\tilde{n} + 1)(\tilde{n} + 2j + 3) \cosh [(2j + 1)\tilde{x}] \end{aligned} \quad (2.30)$$

umschreiben lässt. Um die Summen zusammenfassen zu können, müssen noch einige Terme herausgezogen werden:

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{j=0}^k \cosh [(2j + 1)\tilde{x}] \{ C_{2j+1} [(2j + 1)^2 + \epsilon] \\ &+ C_{2j-1} s(\tilde{n} + 1)(\tilde{n} + 1 - 2j) + C_{2j+3} s(\tilde{n} + 1)(\tilde{n} + 3 + 2j) \} \\ &+ C_{2k+1} s(\tilde{n} + 1)(\tilde{n} - 1 - 2k) \cosh [(2k + 3)\tilde{x}] - C_{-1} s(\tilde{n} + 1)^2 \cosh(\tilde{x}) \\ &+ C_1 s(\tilde{n} + 1)^2 \cosh(-\tilde{x}) - C_{2k+3} s(\tilde{n} + 1)(\tilde{n} + 3 + 2k) \cosh [(2k + 1)\tilde{x}] \end{aligned} \quad (2.31)$$

Die Koeffizienten C_i mit $i < 0$ oder $i > k$ sind null, da hier nur endliche Summen betrachtet werden. Unter Ausnutzung der Symmetrie des Kosinus Hyperbolicus vereinfacht sich die Gleichung weiter zu

$$0 = \sum_{j=0}^k \cosh[(2j+1)\tilde{x}] \{ C_{2j+1} [(2j+1)^2 + \epsilon + s(\tilde{n}+1)^2 \delta_{j0}] + C_{2j-1} s(\tilde{n}+1)(\tilde{n}+1-2j) + C_{2j+3} s(\tilde{n}+1)(\tilde{n}+3+2j) \}. \quad (2.32)$$

Wenn alle Vorfaktoren wegfallen verschwindet diese Summe offensichtlich und die Gleichung ist erfüllt. Ein analoges Vorgehen für die anderen Ansätze liefert schließlich die vier Rekursionsgleichungen für die Koeffizienten S_l bzw. C_l der Reihenentwicklung:

$$\left[\begin{array}{l} [(2j+1)^2 + \epsilon + s(\tilde{n}+1)^2 \delta_{j0}] C_{2j+1} + s(\tilde{n}+1)(\tilde{n}+1-2j) C_{2j-1} \\ + s(\tilde{n}+1)(\tilde{n}+3+2j) C_{2j+3} = 0 \end{array} \right. \quad (2.33)$$

$$\left[\begin{array}{l} [(2j+1)^2 + \epsilon - s(\tilde{n}+1)^2 \delta_{j0}] S_{2j+1} + s(\tilde{n}+1)(\tilde{n}+1-2j) S_{2j-1} \\ + s(\tilde{n}+1)(\tilde{n}+3+2j) S_{2j+3} = 0 \end{array} \right. \quad (2.34)$$

$$\left[\begin{array}{l} [(2j)^2 + \epsilon] C_{2j} + 2s(\tilde{n}+1) \left[\frac{\tilde{n}}{2}(1 + \delta_{j1}) + 1 - j \right] C_{2j-2} \\ + s(\tilde{n}+1)(\tilde{n}+2+2j) C_{2j+2} = 0 \end{array} \right. \quad (2.35)$$

$$\left[\begin{array}{l} [(2j)^2 + \epsilon] S_{2j} + 2s(\tilde{n}+1) \left[\frac{\tilde{n}}{2}(1 - \delta_{j1}) + 1 - j \right] S_{2j-2} \\ + s(\tilde{n}+1)(\tilde{n}+2+2j) S_{2j+2} = 0 \end{array} \right. \quad (2.36)$$

Dabei sind die Gleichungen (2.33) und (2.34) für ungerade \tilde{n} und Gleichungen (2.35) und (2.36) für gerade \tilde{n} gültig und j liegt in dem Intervall $[0, k]$, wobei

$$k = \begin{cases} \frac{\tilde{n}-1}{2}, & \text{für ungerade } \tilde{n} \\ \frac{\tilde{n}}{2}, & \text{für gerade } \tilde{n}. \end{cases}$$

Außerdem gilt für die Koeffizienten $S_i = C_i = 0 \forall i \notin \{0, \dots, \tilde{n}\}$.

Mit den Gleichungen (2.33) bis (2.36) lassen sich bei gegebenem \tilde{n} zwei Gleichungssysteme $A \cdot \mathbf{C} = 0$ bzw. $B \cdot \mathbf{D} = 0$ aufstellen, wobei A und B Koeffizientenmatrizen sind

und \mathbf{C} bzw. \mathbf{D} Spaltenvektoren mit den Unbekannten. Damit die Systeme nichttriviale Lösungen besitzen, muss $\det(A) = \det(B) = 0$ gelten. Die Lösungen dieser Gleichungen liefern dann die Eigenenergien ϵ_m mit $m \in \{0, \dots, \tilde{n}\}$. Eine analytische Lösung ist allerdings nur für niedrige Werte von \tilde{n} möglich. In Abschnitt 4.2 werden die Gleichungen für $\tilde{n} = 6$ und $\tilde{n} = 7$ deshalb mit dem Newton-Verfahren berechnet.

3 Implementierung

Für diese Arbeit wurden zwei Programme in C++ entwickelt. Das eine implementiert den bereits erläuterten Numerov-Algorithmus, das andere stellt eine Implementierung des Newton-Raphson-Verfahrens dar. Sowohl der Quelltext als auch die kompilierten Versionen für Linux beider Programme liegen dieser Arbeit in den jeweiligen Ordnern bei.

3.1 Das Numerov-Programm

Das oben vorgestellte Verfahren zur numerischen Berechnung der Eigenenergien und Eigenfunktionen wurde in dem Programm `numerov` implementiert. Es ist in der Lage, die Eigenenergien und Eigenfunktionen zu symmetrischen Potentialen zu finden. Der Lösungsalgorithmus ist in zwei Funktionen unterteilt. Die Funktion `main` wird beim Programmstart aufgerufen und übernimmt die Eingabe der Parameter und des Potentials, die Ausgabe der gefundenen Eigenenergien und Eigenfunktionen sowie das Einstellen der Energie. Es ruft dann die Funktion `numerov` mit dem eingegebenen Potential und den gewählten Parametern auf. Diese Funktion berechnet zunächst F an jeder Stelle, bevor es die Anfangswerte für die Rekursion liefert und schließlich diese Rekursion durchführt. Werden für die gewünschte Quantenzahl zu viele Knoten gezählt, bricht die Funktion die Rekursion direkt ab und teilt dies der `main`-Funktion mit. Diese korrigiert dann die Energie zu einem kleineren Wert und ruft `numerov` erneut auf. Die Iteration endet, wenn die gewünschte Genauigkeit erreicht wird.

Nach dem Aufruf fragt das Programm zunächst, ob die Ausgabedateien neu angelegt, oder ob die Ergebnisse an bestehende Dateien angehängt werden sollen. Dies ist beispielsweise sinnvoll, wenn das Programm mehrmals hintereinander mit einem leicht veränderten Potential aufgerufen wird und die Ergebnisse verglichen werden sollen. Die Ausgabedateien werden `energien.txt` und `wellen.txt` genannt und finden sich nach Beendigung des Programms in demselben Verzeichnis wieder.

Danach wird der Benutzer aufgefordert anzugeben, wie weit das Programm die Wellenfunktionen berechnen soll. Hier sollte ein x -Wert möglichst weit im klassisch verbotenen Bereich eingegeben werden, da die Wellenfunktionen für den maximalen x -Wert möglichst nahe bei Null liegen sollten. Ein größerer Wert für x bedeutet somit eine höhere Genauigkeit, jedoch geht dies zulasten der benötigten Zeit und des Speichers. Es

gilt somit, einen Kompromiss zwischen Genauigkeit und Aufwand zu finden. Für das Razavy-Potential ist hier ein Wert von fünf praktikabel. Dieser liegt selbst für größere Energien schon weit im klassisch verbotenen Bereich, wie in den Abbildungen 1 und 2 zu sehen ist.

Anschließend fragt das Programm nach der Schrittweite h , mit der die Wellenfunktionen berechnet werden sollen. Hier ist ein kleinerer Wert im Allgemeinen für eine höhere Genauigkeit verantwortlich, wohingegen ein größerer Wert die Performance verbessert. Für das Razavy-Potential hat sich ein Wert von 0,0001 als gut erwiesen.

Mit der nächsten Eingabe kann der Benutzer dem Programm ein Potential in der Form einer Zeichenkette übergeben. Dieses wird mit der unter der MIT-Lizenz veröffentlichten Bibliothek `muParser` in einen berechenbaren Ausdruck überführt. Eine Anleitung zur erlaubten Syntax von `muParser` sowie die Lizenz liegen dem Programm bei. Das eingegebene Potential muss nicht symmetrisch sein, jedoch wird hier nur der Bereich $x \geq 0$ berücksichtigt. Für $x < 0$ wird das Potential lediglich gespiegelt, sodass immer ein symmetrisches Potential vorliegt. Wird ein nicht-symmetrisches Potential eingegeben, so liefert das Programm hierfür keine korrekten Ergebnisse.

Anschließend wird nach dem Intervall der Hauptquantenzahl gefragt, für welches die Eigenenergien und Eigenfunktionen berechnet werden sollen. Die Zählung der Hauptquantenzahl startet bei Null.

Für die Eingabe der Genauigkeit ist es lediglich erforderlich, einen Exponenten m als positive Zahl einzugeben. Die Genauigkeit wird dann zu 10^{-m} gesetzt und als Abbruchkriterium für die Bisektion (siehe Seite 4) verwendet. Zur Untersuchung des Razavy-Potentials wird der Exponent häufig zu neun gewählt.

Schließlich wird gefragt, ob die Wellenfunktionen zu den Eigenenergien ausgegeben werden sollen. Dies ist nicht erforderlich, wenn ausschließlich die Energiewerte untersucht werden sollen und würde nur unnötig die Performance verschlechtern.

3.2 Das Newton-Raphson-Programm

Bei diesem Programm handelt es sich um ein Hilfsprogramm zur numerischen Lösung der Gleichungen $\det(A) = 0$ und $\det(B) = 0$ für $\tilde{n} = 6$ und $\tilde{n} = 7$. Es verwendet das weit verbreitete Newton-Raphson-Verfahren. Da es hier nur auf vier Gleichungen angewendet wird, sind diese separat berechneten Determinanten direkt in das Programm einprogrammiert. Der Newton-Algorithmus wurde in einer endrekursiven Variante implementiert und greift zur Bildung der Ableitung auf die Vorwärts-Differenzen-Methode zurück.

Zunächst wird wieder gefragt, ob eine neue Datei erstellt werden oder ob die Ausgabe an das Ende der bestehenden Datei erfolgen soll. Da das Programm eigens für die Untersuchung des Razavy-Potentials geschrieben wurde, wird beim Aufrufen nach den Parametern \tilde{n} und s gefragt. Weiterhin fordert das Programm zur Laufzeit zur Eingabe eines Startwerts für die nächste zu berechnende Nullstelle auf, da diese Startwerte von dem Algorithmus benötigt werden. Die eingegebenen Werte sollten in der Nähe der jeweiligen Nullstellen liegen. Dazu bietet es sich an, die Determinanten zu plotten, die ungefähren Nullstellen abzulesen und diese dem Programm zu übergeben. Die Nullstellen müssen aufsteigend eingegeben werden und im Fall $\tilde{n} = 6$ muss die Nullstelle bei $\epsilon = 0$ ignoriert werden, da die zu $\epsilon = 0$ gehörige Wellenfunktion Ψ überall null und somit uninteressant ist. Die Ausgabe erfolgt in die Datei `nullstellen.txt`

4 Evaluation

Für die folgenden Berechnungen wird aufgrund der Zweckmäßigkeit $\hbar = m = 1$ gesetzt.

4.1 Verifizierung des Programms

Bevor das Programm auf das Razavy-Potential angewendet werden kann, muss sichergestellt werden, dass es korrekte Ergebnisse liefert. Dazu wird es an zwei bekannten Potentialen getestet.

4.1.1 Harmonischer Oszillator

Für den harmonischen Oszillator mit dem Potential

$$V(x) = \frac{1}{2}\omega^2 x^2 \quad (4.1)$$

sind die Eigenenergien E_n durch

$$E_n = \omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (4.2)$$

gegeben. Die Gegenüberstellung der numerischen und analytischen Lösung für $\omega = 1$ liefert folgende Grafik:

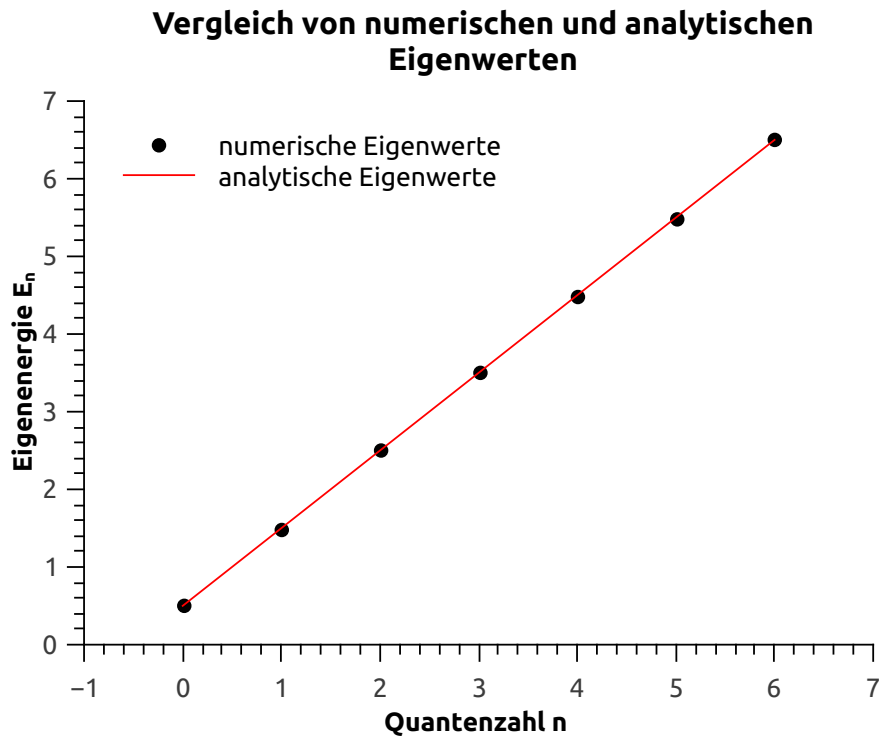


Abbildung 3 – Vergleich des Numerov-Algorithmus mit den analytischen Lösungen des harmonischen Oszillators mit einem maximalen x -Wert von 10, einer Schrittweite $h = 0,001$ und einer relativen Genauigkeit von 10^{-9} (Anmerkung: die analytischen Eigenwerte sind nur aus Darstellungsgründen als durchgehende Linie eingezeichnet. Da n diskret ist, existieren die analytischen Lösungen nur an den Punkten, an denen auch die numerischen Werte eingezeichnet sind.)

Das Programm liefert offenbar die richtigen Ergebnisse. Trägt man die absolute Abweichung von den analytischen Werten und die vom Programm ausgegebenen Unsicherheiten auf, so zeigt sich, dass die tatsächliche Abweichung stets kleiner ist als die Unsicherheit.

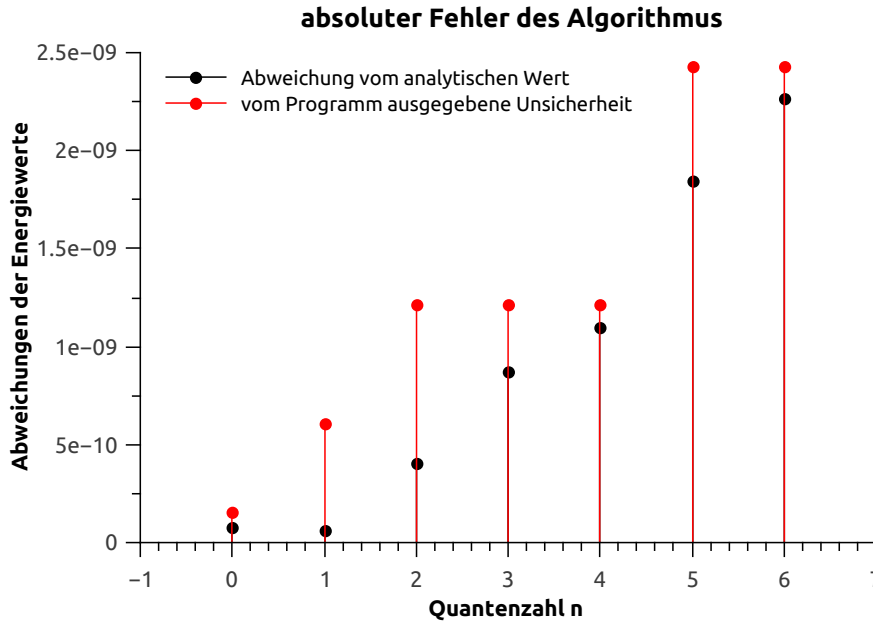


Abbildung 4 – Untersuchung der angegebenen Unsicherheit und der tatsächlichen Abweichung

4.1.2 Modifiziertes Pöschl-Teller-Potential

Ein weiteres, gut geeignetes Potential zum Testen des Programms ist das um V_0 verschobene symmetrische Pöschl-Teller-Potential

$$V(x) = \frac{-V_0}{\cosh(\alpha x)^2} + V_0 \quad (4.3)$$

mit der Potentialtiefe $V_0 > 0$, welches auch als modifiziertes Pöschl-Teller-Potential bezeichnet wird. Für dieses Potential gibt es nur eine begrenzte Anzahl an gebundenen Zuständen, da es für große x gegen V_0 konvergiert. In [LL77, S. 73–74] wird gezeigt, dass sich die Eigenenergien durch

$$E_n = -\frac{\alpha^2}{8} \left[-(1 + 2n) + \sqrt{1 + \frac{8V_0}{\alpha^2}} \right]^2 + V_0 \quad (4.4)$$

berechnen lassen. Dabei gilt die Einschränkung

$$n < -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{2V_0}{\alpha^2}}. \quad (4.5)$$

Für $\alpha = 1$ und $V_0 = 40$ ergibt sich folgender Vergleich von analytischer und numerischer Lösung:

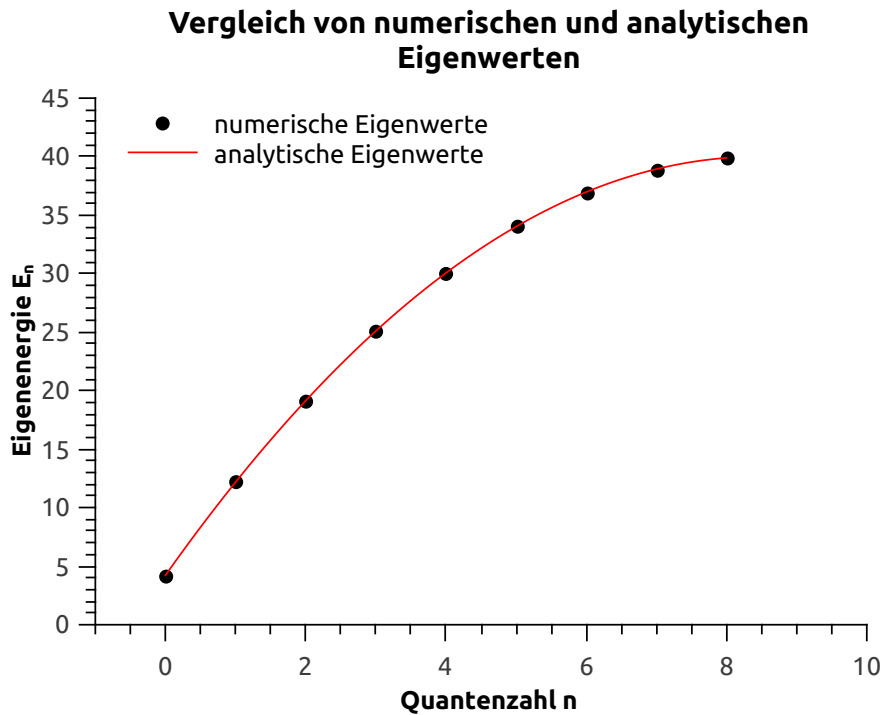


Abbildung 5 – Vergleich des Numerov-Algorithmus mit den analytischen Lösungen des Pöschl-Teller-Potentials mit einem maximalen x -Wert von 6, einer Schrittweite $h = 0,001$ und einer relativen Genauigkeit von 10^{-9}

Das Programm bricht die Berechnung der Eigenenergien automatisch ab, wenn die höchste Quantenzahl erreicht ist. Bedingung (4.5) wird also erfüllt. Weiterhin zeigt sich eine gute Übereinstimmung von numerischer und analytischer Lösung. Werden die absoluten Abweichungen und die angegebenen Unsicherheiten betrachtet, so wird jedoch ersichtlich, dass die absoluten Fehler für die oberen Quantenzahlen größer sind als die angegebenen Unsicherheiten. Dies bedeutet, dass die tatsächlichen Werte nicht in dem vom Programm angegebenen Intervall liegen.

Tabelle 2 – Unsicherheiten und absolute Abweichungen der numerischen Lösung

Quantenzahl n	absolute Abweichung vom exakten Wert	angegebene Unsicherheit
0	$6,89 \cdot 10^{-10}$	$1,16 \cdot 10^{-9}$
1	$1,77 \cdot 10^{-9}$	$4,16 \cdot 10^{-9}$
2	$5,49 \cdot 10^{-9}$	$6,48 \cdot 10^{-9}$
3	$3,83 \cdot 10^{-9}$	$9,71 \cdot 10^{-9}$
4	$7,54 \cdot 10^{-9}$	$1,39 \cdot 10^{-8}$
5	$3,37 \cdot 10^{-9}$	$9,26 \cdot 10^{-9}$
6	$1,27 \cdot 10^{-8}$	$1,11 \cdot 10^{-8}$
7	$3,80 \cdot 10^{-5}$	$1,13 \cdot 10^{-8}$
8	0,02	$1,58 \cdot 10^{-8}$

Der Grund für dieses Verhalten ist keine Fehlfunktion oder Ungenauigkeit des Programms oder gar des zugrunde liegenden Algorithmus, sondern die Wahl des maximal zu berechnenden x -Wertes. Die oberen Eigenzustände liegen dicht am Übergang zum Kontinuum, weshalb die entsprechenden Wellenfunktionen für große x -Werte nur langsam gegen Null konvergieren. Berechnet man die Wellenfunktionen bis $x = 15$ und lässt die anderen Parameter unverändert, erhält man beispielsweise folgende Werte:

Tabelle 3 – Unsicherheiten und absolute Abweichungen der numerischen Lösung für $x_{max} = 15$

Quantenzahl n	absolute Abweichung vom exakten Wert	angegebene Unsicherheit
6	$9,53 \cdot 10^{-9}$	$1,11 \cdot 10^{-8}$
7	$9,29 \cdot 10^{-9}$	$1,13 \cdot 10^{-8}$
8	$4,27 \cdot 10^{-6}$	$1,58 \cdot 10^{-8}$

Es ist eine deutliche Verbesserung gegenüber der vorherigen Berechnung zu erkennen, auch wenn der analytische Wert für $n = 8$ immer noch nicht in dem angegebenen Intervall liegt. Mit entsprechendem Aufwand ließe sich das Programm so modifizieren, dass es automatisch einen geeigneten Wert für x_{max} wählt und dies idealerweise für jedes n separat tut, um die Laufzeit möglichst kurz zu halten. Für diese Arbeit ist es jedoch nicht zwingend erforderlich, da es schnell ersichtlich ist, ob x_{max} zu klein gewählt wurde.

4.2 Analytische und numerische Lösung des Razavy-Potentials

Aus [Poe11] ist bekannt, dass die exakt berechenbare Energiewerte stets in Paaren auftreten. Für niedrige Werte von s liegen die beiden Energieniveaus eines Paares sehr dicht zusammen und laufen für zunehmende s weiter auseinander. Es liegt also eine Aufspaltung der Energien vor. Hier soll zunächst gezeigt werden, dass diese Energieaufspaltung auch bei der numerischen Lösung auftritt und mit der analytischen Lösung übereinstimmt. Weiterhin kann untersucht werden ob eine Energieaufspaltung auch für Eigenenergien auftritt, die nicht mehr durch die Rekursionsformeln (2.33) bis (2.36) berechnet werden können.

Das Programm wurde bereits verifiziert und kann nun auf das Razavy-Potential angewendet werden. Dieses wurde in 2.2.1 bereits verschoben, so dass es die Bedingung $V(x) \geq 0 \forall x$ erfüllt. Allerdings ergibt sich durch die Umskalierung (2.11) bis (2.15) ein Problem. Zwar gilt bei einer Verschiebung des Potentials $V(x)$ um eine Konstante nach oben, dass die Energiewerte um die gleiche Konstante in Richtung höherer Werte verschoben werden, bei einer Multiplikation mit einer Konstanten ist der Eigenenergiewert jedoch nicht einfach das Produkt aus ursprünglichem Wert und der Konstanten.

Betrachtet man (2.11) und (2.12), so ist ersichtlich, dass die Wahl $\beta = \sqrt{2}$ zu $V(x) = v(x)$ und $E = \epsilon$ führt. Mit dieser Wahl wird das verschobene Potential (2.17) zu:

$$v(x) = (\tilde{n} + 1)^2 \left[s \cosh(2\sqrt{2}x) - 1 \right]^2 \quad (4.6)$$

Wird das Potential dem Programm übergeben, stimmen die erhaltenen Eigenwerte bis auf die Konstante $(\tilde{n} + 1)^2(s^2 + 1)$ mit den analytischen Werten für ϵ überein.

4.2.1 Energieaufspaltung für $\tilde{n} = 5$

Für den Wert $\tilde{n} = 5$ besitzen die Koeffizientenmatrizen A und B , die sich aus den Rekursionsgleichungen ergeben, jeweils eine Determinante dritter Ordnung in ϵ . Die Gleichungen $\det(A) = 0$ und $\det(B) = 0$ lassen sich, wie in [Poe11] gezeigt, mithilfe der Cardanischen Formeln [Bro+05] noch relativ leicht analytisch lösen. Die exakten

Lösungen lauten

$$\epsilon_0 = -\sqrt{-\frac{4}{3}p_c} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(-\frac{q_c}{2} \sqrt{-\frac{27}{p_c^3}} \right) - \frac{\pi}{3} \right] - \frac{35 + 36s}{3} \quad (4.7)$$

$$\epsilon_1 = -\sqrt{-\frac{4}{3}p_s} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(-\frac{q_s}{2} \sqrt{-\frac{27}{p_s^3}} \right) - \frac{\pi}{3} \right] - \frac{35 - 36s}{3} \quad (4.8)$$

$$\epsilon_2 = -\sqrt{-\frac{4}{3}p_c} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(-\frac{q_c}{2} \sqrt{-\frac{27}{p_c^3}} \right) + \frac{\pi}{3} \right] - \frac{35 + 36s}{3} \quad (4.9)$$

$$\epsilon_3 = -\sqrt{-\frac{4}{3}p_s} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(-\frac{q_s}{2} \sqrt{-\frac{27}{p_s^3}} \right) + \frac{\pi}{3} \right] - \frac{35 - 36s}{3} \quad (4.10)$$

$$\epsilon_4 = -\sqrt{-\frac{4}{3}p_c} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(-\frac{q_c}{2} \sqrt{-\frac{27}{p_c^3}} \right) \right] - \frac{35 + 36s}{3} \quad (4.11)$$

$$\epsilon_5 = -\sqrt{-\frac{4}{3}p_s} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(-\frac{q_s}{2} \sqrt{-\frac{27}{p_s^3}} \right) \right] - \frac{35 - 36s}{3}. \quad (4.12)$$

Hier ist $p_c = -\frac{448}{3} + 384s - 2304s^2$, $q_c = \frac{10240}{27} + 512s - 12288s^2$, $p_s = -\frac{448}{3} - 384s - 2304s^2$ und $q_s = \frac{10240}{27} - 512s - 12288s^2$.

Diese exakten Lösungen sind zusammen mit den numerischen Lösungen in Abbildung 6 eingezeichnet. Die numerischen Lösungen sind dabei nur an einigen diskreten Werten von s berechnet worden. Die Parameter, die dem Programm übergeben worden sind, lauten $x_{max} = 5$ sowie $h = 0,0001$. Die relative Genauigkeit wurde auf 10^{-9} eingestellt.

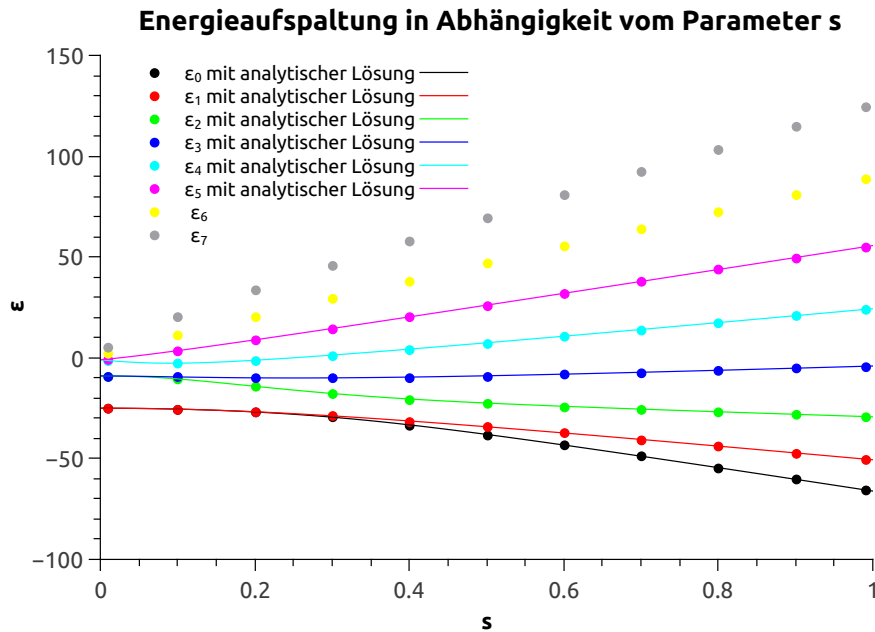


Abbildung 6 – numerisch und analytisch berechnete Eigenenergien des Razavy-Potentials mit $\tilde{n} = 5$ und Energieaufspaltung in Abhängigkeit von s

Es zeigt sich, dass die numerischen Lösungen mit den hier gewählten Parametern sehr gut mit den analytischen Lösungen übereinstimmen. Weiterhin sieht man, dass auch bei den Energieniveaus, für die keine analytische Lösung möglich ist, eine Paarung vorliegt, die sich mit zunehmendem s aufspaltet. Diese Aufspaltung ist umso stärker ausgeprägt, je höher die entsprechenden Niveaus liegen. Dieses Verhalten setzt sich aus dem analytisch lösbaren Teil in den nur numerisch lösbaren Teil des Energiespektrums fort.

Zur genaueren Untersuchung der Abweichungen der numerisch berechneten Eigenenergien von den tatsächlichen können erneut die angegebene Unsicherheit und die absolute Abweichung aufgetragen werden.

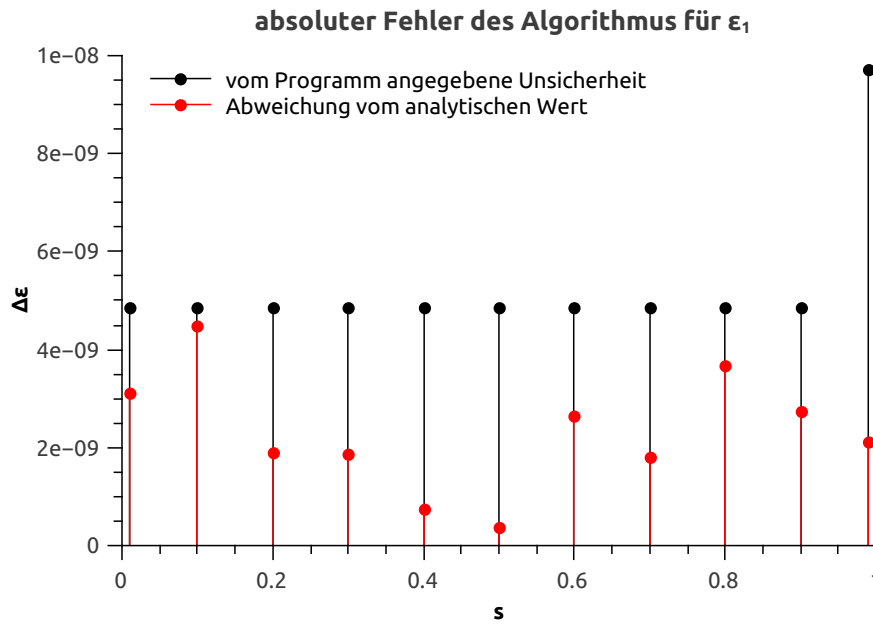


Abbildung 7 – Untersuchung der angegebenen Unsicherheit und der absoluten Abweichung bei ϵ_1

Die tatsächlichen Eigenenergien liegen immer in dem von dem Programm angegebenen Intervall. Dies sagt nicht nur aus, dass die Implementierung des Numerov-Algorithmus auf das Razavy-Potential anwendbar ist, sondern auch, dass die Wahl der Parameter gut ist. Daher wird diese Wahl der Parameter auch in allen weiteren Abbildungen verwendet, sofern keine anderweitigen Angaben gemacht werden.

4.2.2 Energieaufspaltung für $\tilde{n} = 6$

Für $n = 6$ folgen aus den Rekursionsgleichungen die Gleichungssysteme

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \epsilon & 56s & 0 & 0 \\ 84s & 4 + \epsilon & 70s & 0 \\ 0 & 28s & 16 + \epsilon & 84s \\ 0 & 0 & 14s & 36 + \epsilon \end{pmatrix}}_{=:A} \begin{pmatrix} C_0 \\ C_2 \\ C_4 \\ C_6 \end{pmatrix} = 0 \quad (4.13)$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \epsilon & 56s & 0 & 0 \\ 0 & 4 + \epsilon & 70s & 0 \\ 0 & 28s & 16 + \epsilon & 84s \\ 0 & 0 & 14s & 36 + \epsilon \end{pmatrix}}_{=:B} \begin{pmatrix} S_0 \\ S_2 \\ S_4 \\ S_6 \end{pmatrix} = 0 \quad (4.14)$$

mit den Koeffizientenmatrizen A und B . Es müssen also die Nullstellen der folgenden Determinanten bestimmt werden:

$$\det(A) = 5531904s^4 - 1568s^2(5\epsilon^2 + 204\epsilon + 1728) + \epsilon(\epsilon + 4)(\epsilon + 16)(\epsilon + 36) \quad (4.15)$$

$$\det(B) = \epsilon((\epsilon + 4)(\epsilon + 16)(\epsilon + 36) - 3136s^2(\epsilon + 24)). \quad (4.16)$$

Die Gleichung $\det(A) = 0$ lässt sich analytisch nur äußerst umständlich lösen, da es sich um eine Gleichung vierter Ordnung handelt. Für $\det(B) = 0$ lassen sich jedoch erneut mithilfe der Cardanischen Formeln Lösungen finden, da sich die Determinante wie in Gleichung (4.16) faktorisieren lässt. Dabei ist die triviale Lösung $\epsilon = 0$ hier uninteressant, da diese eine überall verschwindende Wellenfunktion zur Folge hätte. Die verbleibende Gleichung

$$(\epsilon + 4)(\epsilon + 16)(\epsilon + 36) - 3136s^2(\epsilon + 24) = 0 \quad (4.17)$$

lässt sich mithilfe der Cardanischen Formeln lösen. Ausmultiplizieren liefert

$$\epsilon^3 + 56\epsilon^2 + (784 - 3136s^2)\epsilon + (2304 - 75264s^2) = 0 \quad (4.18)$$

und die Substitution $x = \epsilon + \frac{56}{3}$ vereinfacht die Gleichung weiter zu ihrer reduzierten Form

$$x^3 + \underbrace{\left(-\frac{784}{3} - 3136s^2\right)}_{=:p} x + \underbrace{\frac{18304}{27} - \frac{50176s^2}{3}}_{=:q}. \quad (4.19)$$

Die Diskriminante $D = \left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3$ lautet

$$D = -\frac{16384(1882384s^6 + 355348s^4 + 48559s^2 + 900)}{27} \quad (4.20)$$

und ist somit für alle $s \in (0,1)$ negativ. Es existieren damit drei reelle Lösungen. Sie lauten

$$x_1 = -\sqrt{-\frac{4}{3}p} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(-\frac{q}{2} \sqrt{-\frac{27}{p^3}} \right) + \frac{\pi}{3} \right] \quad (4.21)$$

$$x_3 = \sqrt{-\frac{4}{3}p} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(-\frac{q}{2} \sqrt{-\frac{27}{p^3}} \right) \right] \quad (4.22)$$

$$\text{und } x_5 = -\sqrt{-\frac{4}{3}p} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(-\frac{q}{2} \sqrt{-\frac{27}{p^3}} \right) - \frac{\pi}{3} \right]. \quad (4.23)$$

Rücksubstitution liefert dann die Ergebnisse für ϵ :

$$\epsilon_1 = -\sqrt{-\frac{4}{3}p} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(-\frac{q}{2} \sqrt{-\frac{27}{p^3}} \right) + \frac{\pi}{3} \right] - \frac{56}{3} \quad (4.24)$$

$$\epsilon_3 = \sqrt{-\frac{4}{3}p} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(-\frac{q}{2} \sqrt{-\frac{27}{p^3}} \right) \right] - \frac{56}{3} \quad (4.25)$$

$$\text{und } \epsilon_5 = -\sqrt{-\frac{4}{3}p} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(-\frac{q}{2} \sqrt{-\frac{27}{p^3}} \right) - \frac{\pi}{3} \right] - \frac{56}{3}. \quad (4.26)$$

Für die Berechnung der Energieeigenwerte aus der Gleichung $\det(A) = 0$ wurde das oben erläuterte numerische Lösungsverfahren herangezogen. In der folgenden Abbildung sind die Lösungen dargestellt, die durch dieses Programm gefunden wurden, sowie die Lösungen aus dem Programm, welches den Numerov-Algorithmus verwendet.

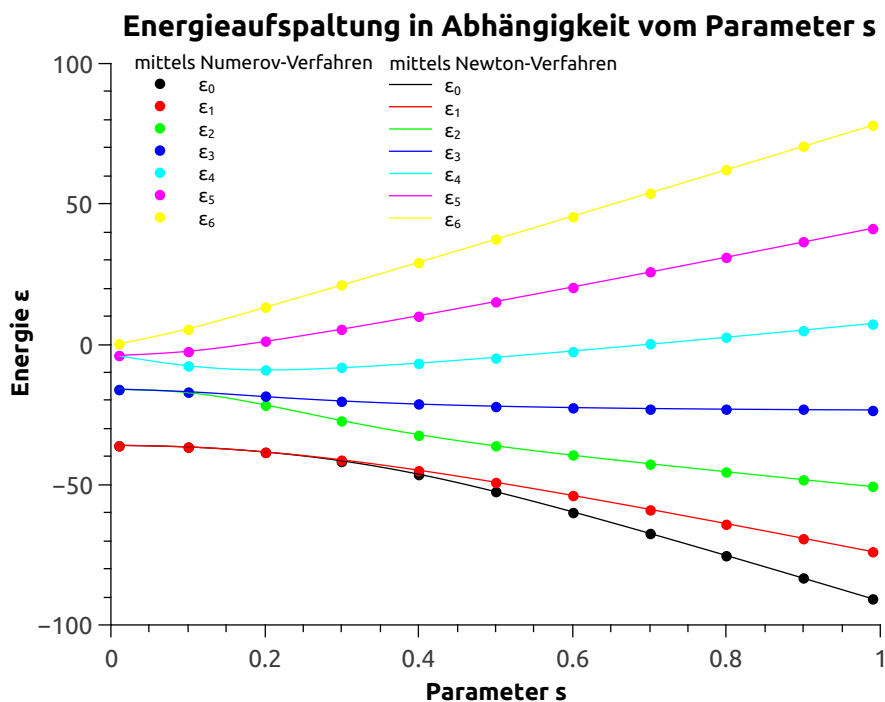


Abbildung 8 – Vergleich der Eigenenergien des Razavy-Potentials mit $\tilde{n} = 6$ und Energieaufspaltung in Abhängigkeit von s , die sich aus der numerischen Lösung der Determinanten ergeben, mit denen, die das Numerov-Verfahren liefert (Anmerkung: Die Nullstellen der Determinanten wurden hier und in den folgenden Abbildungen an den gleichen Stellen berechnet wie beim Numerov-Verfahren und lediglich zu Darstellungszwecken als Splines zwischen den berechneten Punkten aufgetragen)

Die numerisch gefundenen Nullstellen der Determinanten stimmen hervorragend mit den numerischen Lösungen überein, die das Numerov-Verfahren liefert. Das bisher beobachtete Verhalten setzt sich also auch für größere Werte von n fort.

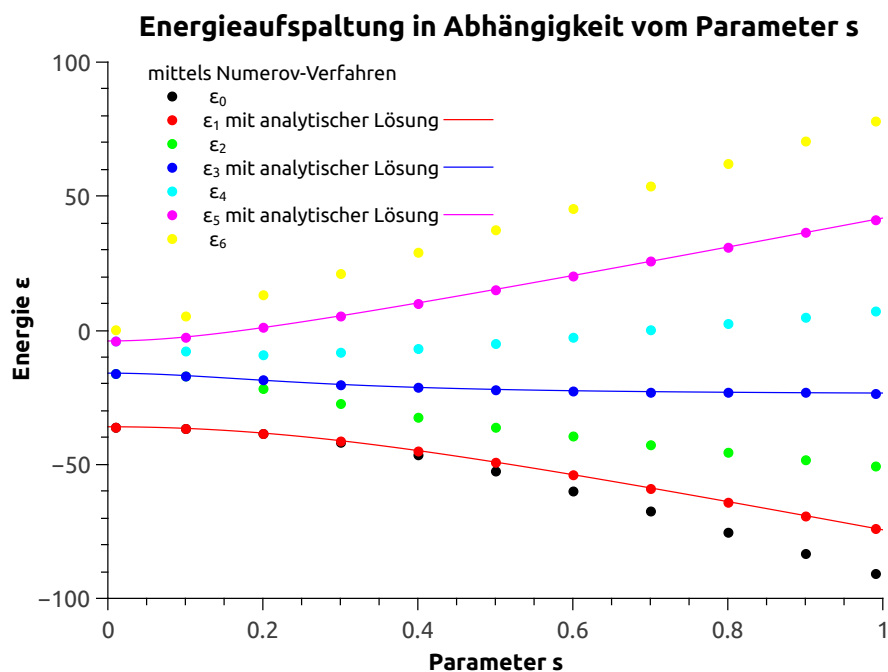


Abbildung 9 – Vergleich der Eigenenergien des Razavy-Potentials mit $\tilde{n} = 6$ und Energieaufspaltung in Abhängigkeit von s , die sich aus der analytischen Lösung der Determinante ergeben, mit denen, die das Numerov-Verfahren liefert

Die Ergebnisse des Numerov-Verfahrens stimmen weiterhin mit der analytischen Lösung überein. Da die Lösungen des Newton-Verfahrens mit denen des Numerov-Verfahrens nahezu identisch sind, lässt sich auch der Rückschluss ziehen, dass das Newton-Verfahren die richtigen Ergebnisse liefert.

4.2.3 Energieaufspaltung für $\tilde{n} = 7$

Für $\tilde{n} = 7$ liefern die Gleichungen (2.35) und (2.36) die Matrizen

$$A = \begin{pmatrix} 64s + \epsilon + 1 & 80s & 0 & 0 \\ 48s & 9 + \epsilon & 96s & 0 \\ 0 & 32s & 25 + \epsilon & 112s \\ 0 & 0 & 16s & 49 + \epsilon \end{pmatrix} \quad (4.27)$$

$$B = \begin{pmatrix} -64s + \epsilon + 1 & 80s & 0 & 0 \\ 48s & 9 + \epsilon & 96s & 0 \\ 0 & 32s & 25 + \epsilon & 112s \\ 0 & 0 & 16s & 49 + \epsilon \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

und ihre Determinanten

$$\begin{aligned} \det(A) &= 6881280s^4 - 16384s^3(19\epsilon + 651) - 512s^2(17\epsilon^2 + 890\epsilon + 9513) \\ &\quad + 64s(\epsilon + 9)(\epsilon + 25)(\epsilon + 49) + (\epsilon + 1)(\epsilon + 9)(\epsilon + 25)(\epsilon + 49) \end{aligned} \quad (4.29)$$

$$\begin{aligned} \det(B) &= 6881280s^4 + 16384s^3(19\epsilon + 651) - 512s^2(17\epsilon^2 + 890\epsilon + 9513) \\ &\quad - 64s(\epsilon + 9)(\epsilon + 25)(\epsilon + 49) + (\epsilon + 1)(\epsilon + 9)(\epsilon + 25)(\epsilon + 49). \end{aligned} \quad (4.30)$$

Eine analytische Lösung ist auch hier noch möglich, jedoch sehr aufwendig. Da bereits gezeigt wurde, dass sich die Gleichungen gut mit dem Newton-Raphson-Verfahren lösen lassen, wird auch hier dieses Vorgehen gewählt.

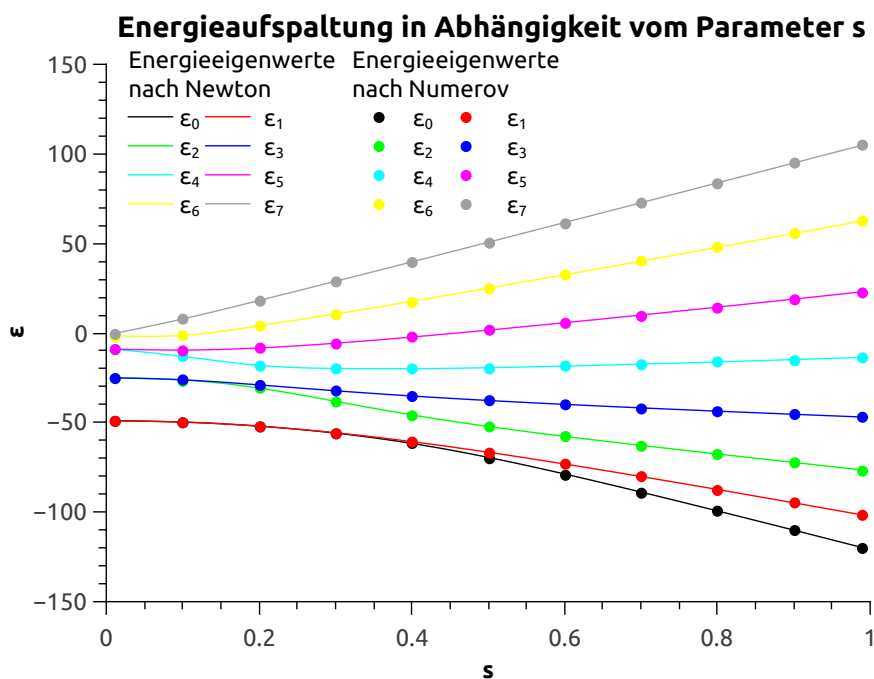


Abbildung 10 – Vergleich der Eigenenergien des Razavy-Potentials mit $\tilde{n} = 7$ und Energieaufspaltung in Abhängigkeit von s , die sich aus der numerischen Berechnung der Nullstellen ergeben, mit denen, die das Numerov-Verfahren liefert

Auch in diesem Fall passen die jeweiligen Lösungen sehr gut zusammen. Alle bisherigen Erkenntnisse treffen auch hier zu. So ist die Aufspaltung der Energien umso größer, je höher die Energieniveaus liegen. Vergleicht man Abbildung 10 mit den vorherigen Abbildungen fällt weiterhin auf, dass die Energien insgesamt niedriger liegen. Dies zeigt, dass der Parameter n die Lage des Potentials beeinflusst, wie schon in Abschnitt 2.2.1 gezeigt wurde.

Für $\tilde{n} = 8$ lässt sich nur noch jeder zweite Energieeigenwert exakt berechnen, da $\det(A)$ ein Polynom fünfter Ordnung in ϵ ist und $\det(B) = \epsilon \cdot \mathcal{O}(\epsilon^4)$. Ab $\tilde{n} = 9$ ist eine analytische Lösung nicht mehr möglich.

Da sich jedoch gezeigt hat, dass beide numerische Lösungswege gute Ergebnisse liefern, stellt dies kein Problem dar. Die bisherigen Untersuchungen lassen sich also ohne großen Aufwand für höhere \tilde{n} fortsetzen, falls dies benötigt wird. Der prinzipielle Erkenntnisgewinn ist jedoch gering, da sich das bisherige Verhalten der Eigenenergien fortsetzt. Deshalb wird eine weitere Betrachtung in dieser Arbeit nicht vorgenommen und stattdessen eine Untersuchung der semiklassischen Näherung für die Aufspaltung der untersten

beiden Energieniveaus des Razavy-Potentials angeschlossen.

4.3 Vergleich der numerischen Lösung mit der semiklassischen Näherung

In [Mün10] wird mit einem euklidischen Pfadintegral ein Ausdruck für die Energieaufspaltung in Doppelmuldenpotentialen hergeleitet. Dieser lautet

$$\Delta E \approx 2 \int \mathcal{D}x e^{-S_E[x]}, \quad (4.31)$$

mit der euklidischen Wirkung

$$S_E = \int_0^\tau d\tau' \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x(\tau')) \right\}. \quad (4.32)$$

Es wird über alle Pfade integriert, die die Randbedingungen

$$x\left(-\frac{T}{2}\right) = -a, \quad x\left(\frac{T}{2}\right) = a \quad (4.33)$$

erfüllen und einen Nulldurchgang aufweisen, wobei anschließend noch der Grenzwert $T \rightarrow \infty$ gebildet werden muss. Dabei sind $-a$ und a die Stellen der Minima, sodass über die dazwischen liegende Potentialbarriere integriert wird.

Da dieses Pfadintegral nicht exakt zu berechnen ist, wird eine semiklassische Näherung verwendet, welche auf den Ausdruck

$$\Delta E = 2K \exp\left(-\int_{-a}^a dx \sqrt{2mV(x)}\right) \quad (4.34)$$

für die Energieaufspaltung führt. Der rechte Term entspricht dem Gamow-Faktor für den Tunneleffekt. Dieser allgemeine Ausdruck für die Energieaufspaltung wird in [Kün14] speziell für das Razavy-Potential berechnet. Für die beiden untersten Energieniveaus ergibt sich die Aufspaltung zu

$$\Delta E = 2\hbar \frac{\beta^2 \hbar}{2m} \frac{4\sqrt{2}(1-s^2)^{\frac{5}{4}}}{s\sqrt{\pi}} (\tilde{n}+1)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{s}{1+\sqrt{1-s^2}}\right)^{\tilde{n}+1} e^{(\tilde{n}+1)\sqrt{1-s^2}}. \quad (4.35)$$

Zur weiteren Auswertung wird $\beta = \sqrt{2}$ gesetzt, damit die Ergebnisse mit den numerischen verglichen werden können.

Da die numerische Lösung des Razavy-Potentials sehr genaue Ergebnisse lieferte, kann ein Vergleich zwischen der Aufspaltung aus der numerischen Berechnung mit derjenigen aus der semiklassischen Näherung die Qualität der Näherung zeigen. Nach [Mün10] ist diese Näherung umso besser, je kleiner die Energieaufspaltung ist. Aus den bisherigen Untersuchungen dieser Arbeit bedeutet dies vor allem, dass der Parameter s klein sein muss.

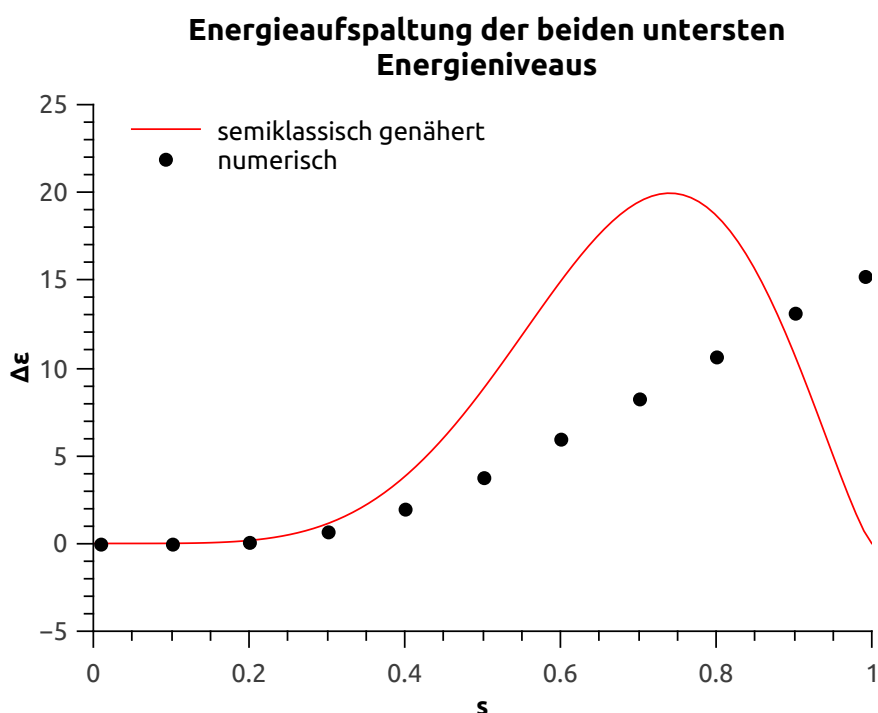


Abbildung 11 – Vergleich der semiklassischen Näherung mit den numerischen Ergebnissen für $\tilde{n} = 5$

Die Grafik zeigt, dass die Abhängigkeit von s in der Tat sehr groß ist. Bis $s = 0,2$ liefert die Näherung gute Ergebnisse, danach entfernt sie sich zunächst immer weiter von der numerischen Lösung. Die semiklassische Näherung liefert bis $s \approx 0,87$ immer größere Energieaufspaltungen als tatsächlich vorliegen. An der Stelle $s \approx 0,87$ stimmt sie dann mit der numerischen Lösung überein und liefert danach zu kleine Energieaufspaltungen. Für $s \rightarrow 1$ liegen die größten Abweichungen vor. Dies wurde bereits vorhergesagt, lässt sich jedoch auch anschaulich zeigen. Betrachtet man Abbildung 1, so zeigt sich, dass

das Razavy-Potential bei $s = 1$ keine Doppelmulde mehr aufweist, was bedeutet, dass es keine Zustände mit geringer Energiedifferenz mehr gibt, zwischen denen ein Übergang durch den Tunneleffekt möglich ist. Dies ist jedoch die Voraussetzung für die semiklassische Näherung. Je näher s bei eins liegt, desto schwächer ist der Doppelmuldencharakter des Potentials ausgeprägt, was die semiklassische Näherung verschlechtert.

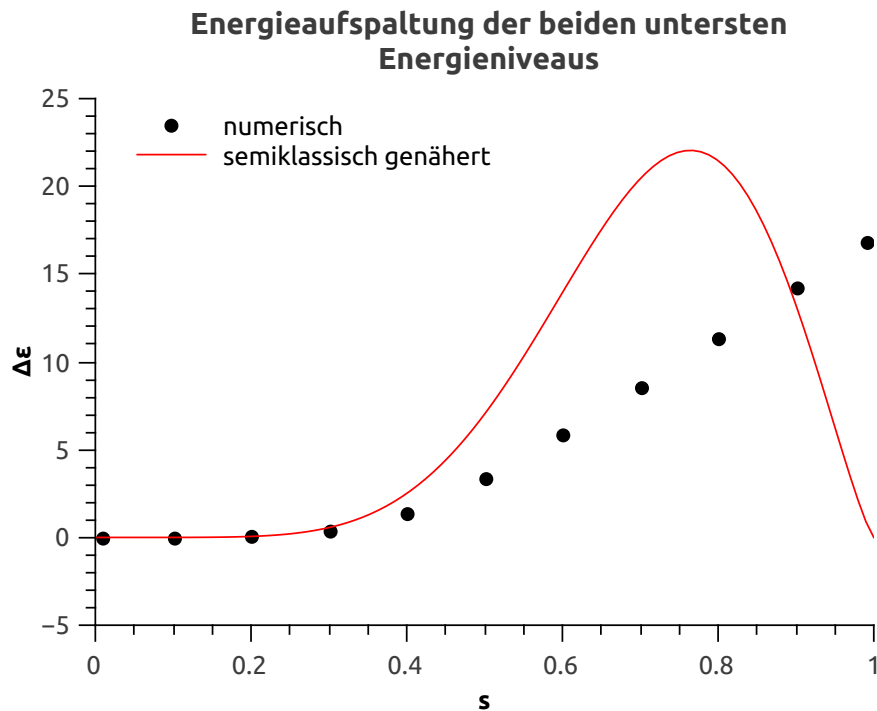


Abbildung 12 – Vergleich der semiklassischen Näherung mit den numerischen Ergebnissen für $\tilde{n} = 6$

Hier verhält sich die semiklassische Näherung ähnlich wie bei $\tilde{n} = 5$. Die Darstellungen geben eine Übersicht über die semiklassische Näherung. Für eine genauere Analyse ist die Skalierung jedoch nicht geeignet. Es bietet sich an, das Verhältnis

$$\frac{\Delta\epsilon_{semi.}}{\Delta\epsilon_{num.}} \quad (4.36)$$

zwischen numerischer und semiklassischer Energieaufspaltung aufzutragen.

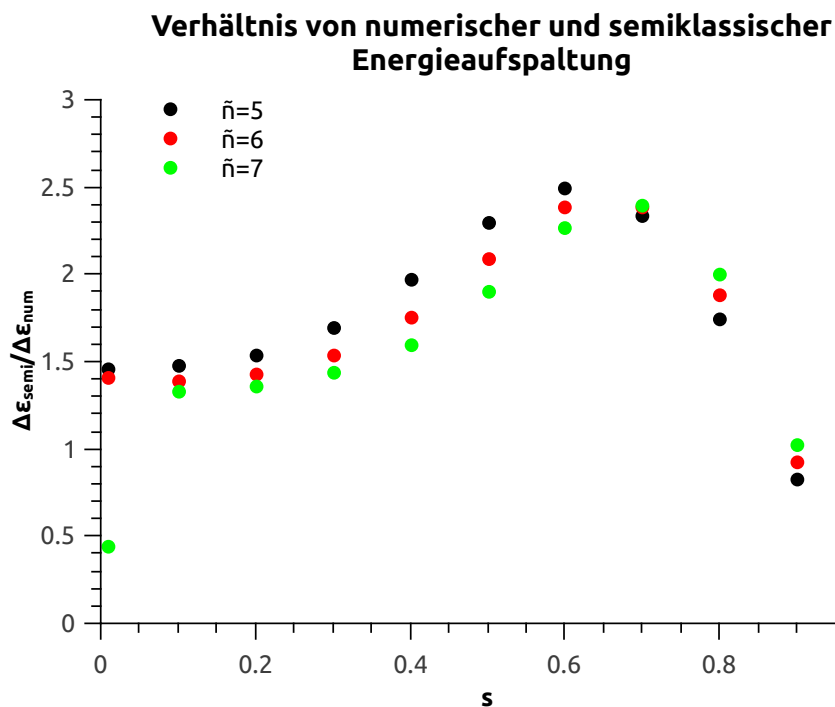


Abbildung 13 – Vergleich der semiklassischen Näherung mit den numerischen Ergebnissen für $\tilde{n} = 5$, $\tilde{n} = 6$ und $\tilde{n} = 7$

Für die Werte von $s = 0,01$ wurde dabei eine relative Genauigkeit von 10^{-11} gewählt, da die Energieaufspaltung in dieser Größenordnung liegt. Hier stößt man für $\tilde{n} = 7$ schon an die Grenzen einer digitalen Rechenanalyse, da der Unterschied zwischen ϵ_0 und ϵ_1 so gering wird, dass die Maschinengenauigkeit eine Rolle spielt. Dies lässt sich nicht einfach durch ein weiteres Herabsetzen der relativen Genauigkeit lösen. Um dieses Problem zu beheben, wäre es möglich, einen anderen Datentyp mit größerer Genauigkeit zu verwenden. Da dies jedoch die einzige Stelle ist, an der solch ein Genauigkeitsproblem auftritt und ein anderer Datentyp die Performance des Programms beeinflussen würde, wird darauf verzichtet. Je näher die Werte bei eins liegen, desto besser ist die semiklassische Näherung an dieser Stelle. Interessant ist hier vor allem die Abhängigkeit von \tilde{n} . Die semiklassische Näherung liefert bei kleinen Werten von s ein besseres Ergebnis für größere Werte von \tilde{n} . Für große Werte von s ist es hingegen besser, wenn \tilde{n} klein ist. Diese Eigenschaft hängt mit der Energieaufspaltung des Grundzustandes zusammen und lässt sich ebenfalls dadurch erklären, dass die Doppelmulde für größere Werte von \tilde{n} stärker ausgeprägt ist. Insgesamt lässt sich folgern, dass die semiklassische Näherung für kleine

s zwar nur kleine absolute Abweichungen aufweist, dass die relative Abweichung jedoch durchgehend groß ist, was sich darin zeigt, dass die Punkte in Abbildung 13 größtenteils bei etwa 1,5 oder darüber liegen. Die Näherung liefert also Energieaufspaltungen, die 50% größer sind als die tatsächlichen. Weiterhin ist die Näherung an der Schnittstelle (vgl. Abbildung 11 und 12) absolut genau, jedoch ist sie an dieser Stelle auch sehr steil, was bedeutet, dass die Näherung in einer kleinen Umgebung um die Schnittstelle sehr schnell schlechter wird.

In [Kün14] wird das Verhalten der semiklassischen Näherung im Grenzfall $s \rightarrow 0$ in Abhängigkeit von \tilde{n} untersucht. Für niedrige Werte von \tilde{n} entspricht das dortige Ergebnis dem hier erhaltenen. Für sehr große Werte von \tilde{n} verbessert sich die Näherung dabei erheblich. So beträgt die relative Abweichung für $\tilde{n} = 201$ im Grenzfall $s \rightarrow 0$ nur noch etwa 1%. Die Verbesserung der Näherung mit zunehmendem \tilde{n} konnte hier ebenfalls im Ansatz gezeigt werden.

5 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde ein Programm zur numerischen Berechnung von Energieeigenwerten zu symmetrischen Potentialen entwickelt, dessen Anwendung auf ein quasi-exakt lösbares Potential untersucht und ein Vergleich mit den analytischen Lösungen vorgenommen. Dabei bestätigte sich die Vermutung, dass das Verhalten der Eigenenergien des Razavy-Potentials auch für Quantenzahlen mit $n > \tilde{n}$ nicht von dem abweicht, welches sich im analytisch lösbaren Teil ergibt. Weiterhin konnte gezeigt werden, dass die numerische Berechnung der Nullstellen der Determinanten aus den Koeffizientenmatrizen für große Werte von \tilde{n} eine gute Alternative zu der Berechnung mit dem Numerov-Verfahren darstellt, wenn nur Eigenenergien mit $n \leq \tilde{n}$ berechnet werden sollen. Die Vorteile dieser Methode liegen in der kurzen Laufzeit und dem geringen Speicherbedarf des Programms. Die Nachteile bestehen darin, dass zunächst die Determinanten berechnet werden müssen und eine ungefähre Position der Nullstellen bekannt sein muss. Hier wäre es möglich, ein weiteres umfangreiches Programm zu entwickeln, das die Determinanten und deren Nullstellen automatisch berechnet. Ein weiterer Vorteil des Numerov-Verfahrens liegt in der Generierung der zu den Eigenenergien gehörigen Wellenfunktionen. Grundsätzlich lieferten beide Methoden jedoch Ergebnisse, die mit den überprüfbar analytischen Lösungen übereinstimmten.

Die semiklassische Näherung wies bei den hier betrachteten Werten von \tilde{n} hingegen sehr große relative Abweichungen auf. Zwar nahmen diese Abweichungen mit steigendem \tilde{n} ab, jedoch waren hier sehr große Werte notwendig, um eine relative Abweichung von unter einem Prozent zu erzielen. Mit den numerischen Methoden war es im Gegensatz dazu sehr leicht möglich, relative Genauigkeiten in einem Bereich von 10^{-9} zu erzielen. Die semiklassische Näherung ist also selbst bei großen Werten von \tilde{n} um Größenordnungen schlechter als die numerischen Methoden, jedoch zeigt das Auftreten des Gamow-Faktors in der Herleitung der Näherung den Zusammenhang zwischen Tunneleffekt und Energieaufspaltung auf.

Im Rahmen dieser Arbeit war es nicht möglich, weitere quasi-exakt lösbare Potentiale zu untersuchen und mit dem hier untersuchten Razavy-Potential zu vergleichen. Bei einer Untersuchung weiterer Potentiale wäre es vor allem interessant, ob sich Parallelen zwischen den Potentialen finden lassen. Auch wäre eine Analyse weiterer Doppelmuldenpotentiale interessant, um deren Energieaufspaltung mit der beim Razavy-Potential zu vergleichen. Hier bestünde zusätzlich die Möglichkeit, die semiklassische Näherung

zu berechnen und die Qualität der Näherung für die unterschiedlichen Potentiale zu vergleichen.

Literaturverzeichnis

- [Bro+05] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew, G. Musiol und H. Mühlig. *Taschenbuch der Mathematik*. 6. Aufl. Wissenschaftlicher Verlag Harri Deutsch GmbH, 2005, S. 40–42 (siehe S. 20).
- [Kem12] M. Kemper. „Numerische Verfahren zur Lösung der stationären Schrödingergleichung“. Bachelorarbeit. Münster: Institut für Theoretische Physik - WWU Münster, 2012 (siehe S. 1 f., 4).
- [Kün14] C. Künstler. „Grundzustandsenergieaufspaltung im RAZAVY-Potential in semiklassischer Näherung. Auf dem Weg zum Faktor \mathcal{K}^c “. Diplomarbeit. Münster: Institut für Theoretische Physik - WWU Münster, 2014 (siehe S. 1, 30, 34).
- [LL77] L. D. Landau und E. M. Lifshitz. *Quantum Mechanics. Non-relativistic Theory*. 3. Aufl. Course of Theoretical Physics 3. Pergamon Press Ltd., 1977 (siehe S. 17).
- [Mün10] G. Münster. *Quantentheorie*. 2. Aufl. Berlin - New York: Walter de Gruyter GmbH, 2010, S. 347–353 (siehe S. 1, 30 f.).
- [Pap11] L. J. Papenfort. „Numerische Lösung der Schrödingergleichung mit dem Numerov-Verfahren“. Bachelorarbeit. Münster: Institut für Theoretische Physik - WWU Münster, 2011 (siehe S. 1 f.).
- [Poe11] W. C. Poel. „Energieaufspaltung im Razavy-Potenzial“. Bachelorarbeit. Münster: Institut für Theoretische Physik - WWU Münster, 2011 (siehe S. 1, 5, 7, 20).
- [Raz80] M. Razavy. „An exactly soluble Schrödinger equation with a bistable potential“. In: *American Journal of Physics* 48.4 (04/1980), S. 285–288 (siehe S. 1, 5, 7).
- [Sch95] J. Schnakenberg. *Algorithmen in der Quantentheorie und Statistischen Physik*. Ulmen: Zimmermann-Neufang, 1995, S. 1–5 (siehe S. 2 f.).

Außerdem wurde folgende Software verwendet:

- NetBeans IDE 7.4 Patch 3, zur Entwicklung der beiden Programme
- QtiPlot 0.9.8.9 svn 2288, zur Erstellung der Graphiken
- muParser 2.2.3, zur Umwandlung von eingegebenen Potentialen in berechenbare Ausdrücke in dem Programm `numerov`

Plagiatserklärung des Studierenden

Hiermit versichere ich, dass die vorliegende Arbeit über

Analytische und numerische Untersuchungen quasi-exakt lösbarer Potentiale
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.

Münster, 24.06.2014

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 eine Datenbank einverstanden.

Münster, 24.06.2014