

Bachelorarbeit im Fach Physik

**Die Energieaufspaltung in quasixakt lösbarer  
quantenmechanischen Doppelmuldenpotenzialen**

**Energy splitting in quasi-exactly solvable  
quantum mechanical double-well potentials**

Markus Michael

26. Januar 2011

---

Diese Fassung der Arbeit unterscheidet sich nur geringfügig von der am 26. Januar 2011 dem Prüfungsamt vorgelegten Version.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Einführung</b>	<b>1</b>
1.1 Einheitensystem . . . . .	2
1.2 Supersymmetrische Quantentheorie . . . . .	2
1.3 Konstruktion von Potenzialen mit zwei exakt bestimmhbaren Zuständen . . . . .	4
1.4 Die Energieaufspaltung in der semiklassischen WKB-Approximation . . . . .	8
<b>2 Analyse der QES-Potenziale Tkachuks</b>	<b>11</b>
2.1 Beispiel 1 . . . . .	11
2.1.1 Der symmetrische Fall $\mathbf{z}_0 = \mathbf{0}$ . . . . .	12
2.1.2 Der asymmetrische Fall $\mathbf{z}_0 \neq \mathbf{0}$ . . . . .	14
2.2 Beispiel 2 . . . . .	16
2.3 Beispiel 3 . . . . .	19
2.4 Beispiel 4 . . . . .	23
<b>3 Die Energien des ersten angeregten Zustands</b>	<b>25</b>
3.1 Zu Beispiel 1 . . . . .	25
3.2 Zu Beispiel 3 . . . . .	27
<b>4 Auf dem Weg zum Vorfaktor K: Die Kinklösung</b>	<b>31</b>
4.1 Kinklösung für Beispiel 1 . . . . .	31
4.2 Kinklösung für Beispiel 3 . . . . .	33
<b>5 Zusammenfassung</b>	<b>35</b>

---

# 1 Einführung

Bekanntermaßen existieren in der schrödingerschen Quantenmechanik einige wenige exakt lösbare Systeme. Diese sind in der Regel sehr einfachen Charakters, ihre Potenziale weisen große Symmetrien auf und schaffen einfache Randbedingungen. Dem steht eine große Zahl mitunter nur wenig komplexerer Systeme gegenüber, deren Lösung nicht auf analytischem Wege gefunden werden kann. Der Kanon der exakt lösbaren Systeme wird noch erweitert durch diejenigen, die als sog. supersymmetrischer Partner eines exakt lösbaren Systems ebenfalls ein solches darstellen. Schließlich erlaubt die supersymmetrische Quantentheorie die Bestimmung einer dritten Klasse, nämlich die der quasiexakt lösbaren Systeme („QES-Systeme“). Eine mögliche Methode dazu wird in [1] vorgestellt und soll hier kurz skizziert werden. Am selben Ort sind auch Beispiele sog. QES-Potenziale aufgeführt, für die sich Grundzustand und erster angeregter Zustand mit ihrem energetischen Abstand exakt berechnen lassen und deren nähere Analyse ein Teil dieser Arbeit ist. Hierbei wurde der Fokus auf Potenziale mit Doppelmuldencharakter gerichtet. Im Falle einer solchen Potenzialform kann man die Energiedifferenz zwischen den beiden untersten Zuständen alternativ in der semiklassischen Approximation berechnen (vgl. [2]). Der Vergleich der Resultate beider Methoden ist ebenfalls Gegenstand dieser Arbeit. Im Rahmen der semiklassischen Näherung spielt die Lösung der klassischen Bewegungsgleichung eines Massenpunktes im umgekehrten Potenzial, die sog. Kinklösung, eine zentrale Rolle und wird deshalb am Schluss der Arbeit für die ausführlicher analysierten Potenzialbeispiele bestimmt.

## 1.1 Einheitensystem

In dieser Arbeit werden durchgehend die Konventionen

$$\hbar \equiv 1 \quad \text{und} \quad m \equiv 1 \quad (1.1)$$

berücksichtigt, wobei  $m$  die Masse repräsentiert. Damit gilt für die Einheiten von Länge, Zeit und Energie:

$$[Z] = [L^2] \quad \text{und} \quad [E] = [Z^{-1}] = [L^{-2}]. \quad (1.2)$$

Weitgehend werden aber in der Analyse zweckmäßiger, dimensionslose Größen verwendet werden.

## 1.2 Supersymmetrische Quantentheorie

Bei der Lösung des harmonischen Oszillators in der Quantenmechanik wird gern das praktische Konzept der Leiteroperatoren  $a^\dagger$  und  $a$  eingeführt. Mit ihrer Hilfe kann man bekanntlich aus einem gegebenen Zustand den Zustand nächsthöherer und -tieferer Energie erhalten. Insbesondere gehen durch mehrfaches Anwenden von  $a^\dagger$  alle Zustände aus dem Grundzustand hervor, der wiederum Eigenzustand von  $a$  ist:

$$a |0\rangle = 0. \quad (1.3)$$

Auch lässt sich der entsprechende Hamiltonoperator durch die Leiteroperatoren

$$H = a^\dagger a + \frac{1}{2} \quad (1.4)$$

sehr übersichtlich ausdrücken. Dieses Prinzip kann man verallgemeinern. Sei mit

$$H_- = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V_-(x) \quad (1.5)$$

ein beliebiges System gegeben, dessen Grundzustandsenergie Null ist. Dann ist

$$H_- \psi_0^- = \left[ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V_-(x) \right] \psi_0^- = 0, \quad (1.6)$$

und es gilt

$$H_- = \frac{1}{2} \left[ -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\psi_0^{--''}}{\psi_0^-} \right] \quad \text{mit} \quad V_-(x) = \frac{1}{2} \frac{\psi_0^{--''}}{\psi_0^-}. \quad (1.7)$$

In dieser Form kann man  $H_-$  analog zum harmonischen Oszillator als Produkt der Operatoren

$$B^\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \mp \frac{d}{dx} - \frac{\psi_0^{--'}}{\psi_0^-} \right] \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \mp \frac{d}{dx} - W(x) \right] \quad (1.8)$$

schreiben. Hier wurde das Superpotenzial

$$W(x) \equiv \frac{\psi_0^{-\prime}}{\psi_0^-} \quad (1.9)$$

gleich mitdefiniert. Die soeben definierten Operatoren sind über

$$B^+ = (B^-)^\dagger \quad (1.10)$$

miteinander verknüpft; man bildet mit ihnen

$$H_- = B^+ B^- = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V_-(x) \quad \text{und} \quad (1.11)$$

$$H_+ = B^- B^+ = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V_+(x). \quad (1.12)$$

Darin ist

$$V_+(x) = V_-(x) - \frac{d}{dx} W(x) = V_-(x) - W'(x) \quad (1.13)$$

das sog. supersymmetrische Partnerpotenzial zu  $V_-(x)$ . Es ist leicht nachzuprüfen, dass

$$V_\pm(x) = \frac{1}{2} [W^2(x) \pm W'(x)] \quad (1.14)$$

gilt. Man hat also zwei Hamiltonoperatoren  $H_-$  und  $H_+$  mit den über (1.13) verbundenen Potenzialen  $V_-(x)$  und  $V_+(x)$ . Die beiden Operatoren haben das gleiche Energiespektrum, allerdings fehlt dem Operator  $H_+$  der unterste Zustand bei  $E = 0$ . Es gilt daher für die Spektren:

$$E_{n+1}^- = E_n^+ \quad \text{und} \quad E_0^- = 0. \quad (1.15)$$

Mit den Operatoren  $B^\pm$  ist es nun möglich, zwischen den Zuständen der supersymmetrischen Partner auf gleichem Energieniveau zu wechseln. Dies geschieht nach den Regeln

$$\psi_{n+1}^-(x) = \frac{1}{\sqrt{E_n^+}} B^+ \psi_n^+(x) \quad \text{und} \quad (1.16)$$

$$\psi_n^+(x) = \frac{1}{\sqrt{E_{n+1}^-}} B^- \psi_{n+1}^-(x). \quad (1.17)$$

Anschaufung dazu findet sich in Abbildung 1.

Den Übergang von einem System zum anderen mittels der Operatoren  $B^-$  bzw.  $B^+$  kann man sich zunutze machen, wenn beispielsweise das Spektrum von  $H_-$  bekannt ist.  $H_+$  ist möglicherweise komplizierter Natur und seine Eigenzustände sind ohne weiteres nicht zu berechnen. Diese werden jedoch einfach durch Anwendung von  $B^-$  aus den Eigenzuständen von  $H_-$  erhalten.

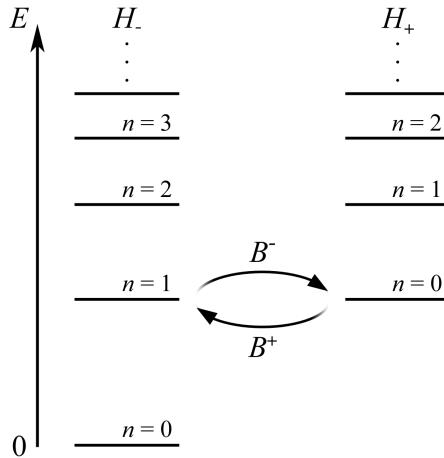


Abbildung 1: Schematische Darstellung der Energieniveaus der Partnerpotenziale und der Wirkungsweise der  $B$ -Operatoren.

Andererseits lässt sich auch die Grundzustandswellenfunktion zu  $H_-$  aus einem vorgegebenen Superpotenzial  $W(x)$  bestimmen. Aus (1.9) folgt

$$\psi_0^-(x) = C_0^- e^{-\int dx W(x)} \quad (1.18)$$

mit der Normalisationskonstanten  $C_0^-$ . Abschließend sei erwähnt, dass für eine Normierbarkeit von  $\psi_0^-$

$$\text{sign}[W(x \rightarrow \infty)] = 1 = -\text{sign}[W(x \rightarrow -\infty)] \quad (1.19)$$

gefordert werden muss, denn nur so ist die Exponentialfunktion in (1.18) beschränkt. Das Konzept der supersymmetrischen Quantenmechanik wird in [1] noch erweitert, was im folgenden Abschnitt kurz erläutert werden soll.

### 1.3 Konstruktion von Potenzialen mit zwei exakt bestimmmbaren Zuständen

Die Idee, aus einem zunächst beliebig gewählten Superpotenzial  $W(x)$  neue quantenmechanische Potenziale zu erhalten, deren Eigenzustände und Spektren sich exakt berechnen lassen, erscheint interessant. Aus  $W(x)$  kann aber nur der Grundzustand  $\psi_0^-(x)$  direkt ermittelt werden, die angeregten Zustände sind nicht bekannt. Geschickte Konstruktion neuer supersymmetrischer Hamiltonpartneroperatoren erlaubt es, zumindest den ersten angeregten Zustand ebenfalls zu berechnen. Der Hamiltonoperator

$$H_-^{(1)} = H_+ - \varepsilon \quad (1.20)$$

hat die Grundzustandsenergie 0, wenn  $\varepsilon$  der ersten Anregungsenergie von  $H_-$ ,  $E_1^-$ , entspricht. Es lassen sich dann analog

$$V_-^{(1)}(x) = V_+(x) - E_1^- = \frac{1}{2}[W_1^2(x) - W_1'(x)] \quad (1.21)$$

### 1.3 Konstruktion von Potenzialen mit zwei exakt bestimmmbaren Zuständen

und

$$B_1^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \mp \frac{d}{dx} + W_1(x) \right) \quad (1.22)$$

bilden. Das Spektrum von  $H_-^{(1)}$  ist also das von  $H_+$ , um  $E_1^-$  verschoben, während die Wellenfunktionen beider Systeme die gleiche Gestalt haben. Eine graphische Darstellung der energetischen Situation ist in Abbildung 2 zu finden.

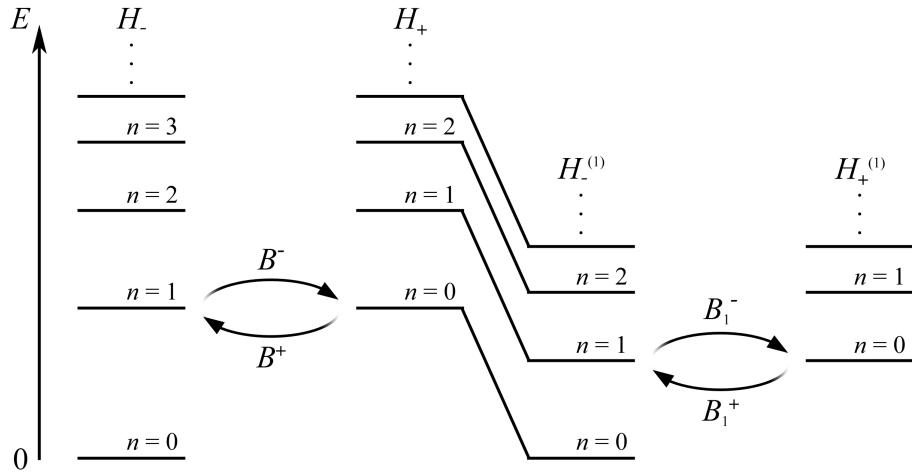


Abbildung 2: Schematische Darstellung des erweiterten Systems supersymmetrischer Partnerpotenziale.

Es gilt demnach

$$\psi_1^-(x) = C_1^- B^+ \psi_0^+(x) = C_1^- B^+ \psi_0^{-(1)}(x) = C_1^- B^+ e^{- \int dx W_1(x)}, \quad (1.23)$$

d. h. bei Kenntnis von  $W(x)$  ( $\rightarrow B^+$ ) und  $W_1(x)$  ist ohne weiteres der erste angeregte Zustand analytisch zugänglich. Die beiden Superpotenziale sind allerdings nicht voneinander unabhängig. Vielmehr ergibt sich aus (1.21) und (1.13) der Zusammenhang

$$W^2(x) + W'(x) = W_1^2(x) - W_1'(x) + 2E_1^-. \quad (1.24)$$

Gibt man darin ein Potenzial vor, so erhält man für das jeweils andere eine Riccati-Differentialgleichung, die sich nicht mit gewöhnlichen Methoden integrieren lässt. Es ist aber möglich, mit den Hilfspotenzialen

$$W_+(x) = W_1(x) + W(x) \quad \text{und} \quad (1.25)$$

$$W_-(x) = W_1(x) - W(x) \quad (1.26)$$

die nichtlinearen Terme  $W_1^2(x)$  und  $W^2(x)$  aus (1.24) zu eliminieren:

$$W'_+(x) = W_-(x)W_+(x) + 2E_1^-. \quad (1.27)$$

## 1 Einführung

---

Mithilfe letzterer Gleichung findet man schließlich

$$W(x) = \frac{1}{2} [W_+(x) - W_-(x)] = \frac{1}{2} \left[ W_+(x) - \frac{W'_+(x) - 2E_1^-}{W_+(x)} \right] \quad \text{sowie} \quad (1.28)$$

$$W_1(x) = \frac{1}{2} [W_+(x) + W_-(x)] = \frac{1}{2} \left[ W_+(x) + \frac{W'_+(x) - 2E_1^-}{W_+(x)} \right]. \quad (1.29)$$

$W_+(x)$  ist nun einigermaßen frei wählbar, Probleme können aber in Form von Singularitäten an den Nullstellen von  $W_+(x)$  auftreten. Wegen (1.19) existiert derer nach (1.25) mindestens eine. Um Singularitäten zu vermeiden, beschränkt man sich auf solche  $W_+(x)$ , die nur eine Nullstelle  $x_0$  besitzen und in deren Umgebung stetig differenzierbar sind. Fordert man zusätzlich

$$W'_+(x_0) = 2E_1^-, \quad (1.30)$$

so bestimmen sich die singularitätsfreien Superpotenziale zu

$$W(x) = \frac{1}{2} \left[ W_+(x) - \frac{W'_+(x) - W'_+(x_0)}{W_+(x)} \right] \quad \text{und} \quad (1.31)$$

$$W_1(x) = \frac{1}{2} \left[ W_+(x) + \frac{W'_+(x) - W'_+(x_0)}{W_+(x)} \right]. \quad (1.32)$$

Das „gewöhnliche“ Potenzial  $V_-(x)$  berechnet sich dann gemäß (1.13) aus  $W(x)$ , der erste angeregte Eigenzustand  $\psi_1^-$  nach (1.23). Die Energie dieses Zustands, die auch dem energetischen Abstand zum auf Null liegenden Grundzustand  $\psi_0^-$  entspricht, wird wegen (1.30) bis auf eventuell auftretende Parameter durch die Wahl von  $W_+(x)$  festgelegt.

Im vorliegenden Artikel [1] werden noch vier Beispiele für  $W_+(x)$  angegeben, die auch zentraler Inhalt dieser Arbeit sind und deshalb hier kurz mitsamt ihrem Ausdruck für den Energieabstand  $E_1^-$  aufgelistet werden.

### Beispiel 1

Das Superpotenzial

$$W_+(x) = A[\sinh(\alpha x) - \sinh(\alpha x_0)] \quad (1.33)$$

mit  $A, \alpha > 0$  hat seine einzige Nullstelle bei  $x_0$ . Seine Ableitung ist

$$W'_+(x) = \alpha A \cosh(\alpha x), \quad (1.34)$$

der erste angeregte Zustand liegt also bei

$$E_1^- = \frac{1}{2} W'_+(x_0) = \frac{1}{2} \alpha A \cosh(\alpha x_0). \quad (1.35)$$

Damit lassen sich nach (1.31) und (1.32) die Superpotenziale  $W(x)$  und  $W_1(x)$  finden:

$$W(x) = \frac{1}{2} \left\{ A [\sinh(\alpha x) - \sinh(\alpha x_0)] - \alpha \tanh \left[ \frac{1}{2} \alpha (x + x_0) \right] \right\}, \quad (1.36)$$

$$W_1(x) = \frac{1}{2} \left\{ A [\sinh(\alpha x) - \sinh(\alpha x_0)] + \alpha \tanh \left[ \frac{1}{2} \alpha (x + x_0) \right] \right\}. \quad (1.37)$$

### 1.3 Konstruktion von Potenzialen mit zwei exakt bestimmmbaren Zuständen

Aus  $W(x)$  wiederum erhält man schließlich das zugehörige Potenzial

$$V_-(x) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{A^2}{4} [\sinh(\alpha x) - \sinh(\alpha x_0)]^2 - A\alpha \left[ \cosh(\alpha x) - \frac{1}{2} \cosh(\alpha x_0) \right] + \frac{\alpha^2}{4} \right\}. \quad (1.38)$$

#### Beispiel 2

Eine weitere Möglichkeit ist

$$W_+(x) = \frac{A \sinh(\alpha x)}{b + c \cosh(\alpha x)}, \quad (1.39)$$

das entsprechende Potenzial lautet

$$V_-(x) = \frac{1}{8c^2} \left( \frac{(b^2 - c^2)(A + \alpha c)(A + 3\alpha c)}{[b + c \cosh(\alpha x)]^2} - \frac{2b(A + \alpha c)^2}{b + c \cosh(\alpha x)} + \frac{\alpha^2 b c^3}{(b + c)^2} \frac{1}{\cosh^2(\alpha x/2)} + \frac{(\alpha c^2 + A(b + c))^2}{(b + c)^2} \right), \quad (1.40)$$

wobei  $A, \alpha, c > 0$  und für die Endlichkeit beider Ausdrücke  $b + c > 0$  gefordert wird. Energie des ersten angeregten Zustands ist

$$E_1^- = \frac{\alpha A}{2(b + c)}. \quad (1.41)$$

#### Beispiel 3

Aus

$$W_+(x) = ax + bx^3, \quad (1.42)$$

$a, b > 0$ , ergibt sich das Potenzial

$$V_-(x) = \frac{1}{8}(a^2 - 12b)x^2 + \frac{1}{4}abx^4 + \frac{1}{8}b^2x^6 + \frac{3ab}{8(a + bx^2)^2} + \frac{3b}{8(a + bx^2)} - \frac{1}{4}a \quad (1.43)$$

mit

$$E_1^- = \frac{1}{2}a. \quad (1.44)$$

#### Beispiel 4

Zuletzt gehören zu

$$W_+(x) = \frac{Ax}{\sqrt{b^2 + x^2}} \quad (1.45)$$

mit  $A > 0$  das Potenzial

$$V_-(x) = \frac{1 - A^2 b^2}{8(b^2 + x^2)} - \frac{Ab^2}{2(b^2 + x^2)^{\frac{3}{2}}} - \frac{5b^2}{8(b^2 + x^2)^2} + \frac{(1 + Ab)^2}{8b^2} \quad (1.46)$$

und die Energie

$$E_1^- = \frac{A}{2b}. \quad (1.47)$$

Von besonderem Interesse ist die erste Anregungsenergie, die in diesem Verfahren „mitkonstruiert“ wird und demzufolge durch einen exakten Ausdruck gegeben ist. Alternativ lässt sich über einen semiklassischen Zugang ein genäherter Ausdruck finden, dessen Herleitung im folgenden Abschnitt skizziert wird.

## 1.4 Die Energieaufspaltung in der semiklassischen WKB-Approximation

Im speziellen Fall eines Doppelmuldenpotenzials kann näherungsweise eine Aussage über die Energieaufspaltung zwischen Grundzustand und erstem angeregten Zustand mittels der Tunnelwahrscheinlichkeit zwischen den beiden Mulden, die auch maßgeblich für diese relativ kleine Aufspaltung verantwortlich ist, erhalten werden. Die beiden unteren Zustände sind symmetrisch ( $\psi_0^-$ ) und antisymmetrisch ( $\psi_1^-$ ) und sehen etwa so aus, wie in Abbildung 3 dargestellt.

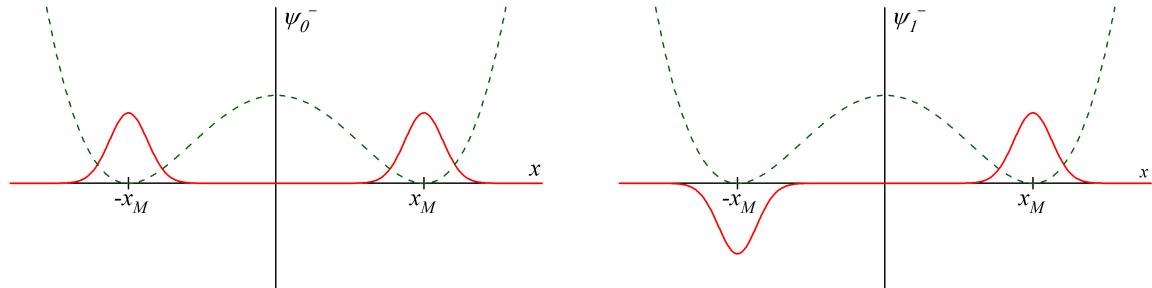


Abbildung 3: Skizzierte Wellenfunktionen der unteren beiden Eigenzustände  $\psi_0^-$  und  $\psi_1^-$  in einem Doppelmuldenpotenzial  $V(x)$ .

Aus ihnen lassen sich zwei Mischzustände bilden, die jeweils hauptsächlich in einer Mulde lokalisiert sind:

$$\psi_l^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0^- - \psi_1^-) \quad \text{und} \quad \psi_r^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0^- + \psi_1^-). \quad (1.48)$$

Die eigentliche Energieaufspaltung ergibt sich nun aus dem Übergangsmatrixelement dieser Mischzustände,

$$\Delta E = -2 \langle \psi_r^- | H | \psi_l^- \rangle. \quad (1.49)$$

## 1.4 Die Energieaufspaltung in der semiklassischen WKB-Approximation

---

In dem diesem Abschnitt zugrundeliegenden Text [2] wird dieses Matrixelement mithilfe eines euklidischen Pfadintegrals berechnet. Ausgangspunkt ist dort die Gleichung

$$\Delta E \approx 2 \int \mathcal{D}x e^{-S_E[x]}, \quad (1.50)$$

integriert wird über alle Pfade  $x(\tau)$ , die die Randbedingungen

$$x\left(-\frac{T}{2}\right) = -x_M \quad \text{sowie} \quad x\left(\frac{T}{2}\right) = x_M \quad (1.51)$$

erfüllen, wobei später der Limes  $T \rightarrow \infty$  gebildet wird. Im Exponenten steht in (1.50) die sogenannte euklidische Wirkung

$$S_E[x] = \int d\tau \left[ \frac{m}{2} \dot{x}^2(\tau) + V(x(\tau)) \right]. \quad (1.52)$$

Sie wird erhalten durch die Transformation  $t = -i\tau$  und hängt über

$$S_E[x(\tau)] = -iS[x(-i\tau)] \quad (1.53)$$

mit der gewöhnlichen Wirkung  $S[x(t)]$  zusammen.

Für die uns interessierenden Potenziale ist (1.50) nicht ohne weiteres berechenbar. Man behilft sich deshalb mit einer quadratischen Näherung von  $S_E[x]$ , das man dazu um den klassischen Pfad  $x_c$  entwickelt. Für einen beliebigen Pfad gelte

$$x(\tau) = x_c(\tau) + y(\tau). \quad (1.54)$$

Dann findet sich für  $S_E$ , wenn man bis zur zweiten Ordnung in  $y(\tau)$  geht:

$$S_E[x] = S_E[x_c] + \frac{1}{2} \int d\tau y(\tau) A y(\tau) + \mathcal{O}(y^3). \quad (1.55)$$

Darin ist  $A$  ein Operator und durch

$$A \equiv -m \frac{d^2}{d\tau^2} + V''(x_c(\tau)) \quad (1.56)$$

definiert. Das Zwischenergebnis für die Energieaufspaltung ist damit

$$\Delta E \approx 2 \int \mathcal{D}y e^{-S_E[x_c] - \frac{1}{2} \int d\tau y(\tau) A y(\tau)} = 2 \cdot N \cdot e^{-S_E[x_c]} (\det(A))^{-\frac{1}{2}}. \quad (1.57)$$

$\det(A)$  ist durch das Produkt der Eigenwerte von  $A$  gegeben,  $N$  ist ein Normierungsfaktor. Im letzten Schritt wurde  $y(\tau) \rightarrow S \cdot q(\tau)$  so transformiert, dass  $A$  durch  $S$  diagonalisiert und so der gesamte Ausdruck ein Produkt von (in diesem Falle unendlich vielen) Gaußfunktionen wird.

Zuletzt lässt sich noch Genaueres über  $S_E[x_c]$  sagen. Die klassische Lösung  $x_c$  ergibt sich aus der Extremalbedingung für  $S_E$ , die wiederum die euklidische Bewegungsgleichung

$$m \frac{d^2x}{d\tau^2} = \frac{dV}{dx} \quad (1.58)$$

## 1 Einführung

---

liefert. Dies ist die Bewegungsgleichung eines Massepunktes, der sich im umgekehrten Potenzial, in  $-V(x)$ , bewegt. Die Lösung heißt auch „Kinklösung“ und wird im Rahmen dieser Arbeit für zwei Potenziale bestimmt. Weiter gilt der Energiesatz in euklidischer Form,

$$\frac{m}{2} \left( \frac{dx}{d\tau} \right)^2 = V(x). \quad (1.59)$$

Damit ist dann

$$S_E[x_c] = \int d\tau \left[ \frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) \right] = \int d\tau m \dot{x}^2 = \int_{-x_M}^{x_M} dx m \dot{x} = \int_{-x_M}^{x_M} dx \sqrt{2mV(x)}, \quad (1.60)$$

so dass der finale Ausdruck für die Energieaufspaltung lautet:

$$\Delta E \approx 2K \cdot \exp \left( - \int_{-x_M}^{x_M} dx \sqrt{2mV(x)} \right). \quad (1.61)$$

Es wurde noch  $K \equiv (\det(A))^{-\frac{1}{2}} N$  gesetzt. Somit ist eine zweite Gleichung für den energetischen Abstand von Grundzustand und erstem angeregten Zustand gefunden. Es manifestiert sich wieder der Zusammenhang der Aufspaltung mit der Tunnelwahrscheinlichkeit, hat doch der soeben erhaltene Ausdruck die Form eines Gamowfaktors. Zu überprüfen bleibt, für welche der im vorangegangenen Abschnitt vorgestellten Potenziale sich das Integral im Exponenten lösen lässt. Die Berechnung des Spektrums von  $A$ , das wiederum für die Bestimmung des Faktors  $K$  benötigt wird, stellt eine erheblich kompliziertere Rechnung dar, die in dieser Arbeit nicht vorgenommen wird.

## 2 Analyse der QES-Potenzi ale Tkachuks

Im Folgenden sollen die soeben vorgestellten QES-Potenzi ale aus [1] auf Symmetrie und auf Doppelmuldencharakter untersucht werden; teilweise lässt sich eine Verwandtschaft mit dem ebenfalls quasiexakt lösbarer Razavy-Potenzi al [4] aufzeigen.

### 2.1 Beispiel 1

Zunächst wird das Potenzi al

$$V_-(x) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{A^2}{4} [\sinh(\alpha x) - \sinh(\alpha x_0)]^2 - \alpha A \left[ \cosh(\alpha x) - \frac{1}{2} \cosh(\alpha x_0) \right] + \frac{\alpha^2}{4} \right\} \quad (2.1)$$

betrachtet.

Zugunsten einer besseren Übersicht schreibt man (2.1) direkt in einer dimensionslosen Form. In dem eingangs festgelegten Einheitensystem kommt der potenzi alen Energie die Einheit „Länge<sup>-2</sup>“ zu, also ist die Dimension der Parameter  $\alpha$  und  $A$  offenbar jeweils das Inverse einer Länge. Es bietet sich der Übergang zu den folgenden, dimensionsfreien Variablen an:

$$z = \alpha x \quad \text{und} \quad \eta = \frac{A}{2\alpha} \quad (2.2)$$

Nach [1] ist  $A, \alpha > 0$  und somit auch  $\eta > 0$ . In der dimensionsfreien Schrödinger-Gleichung

$$\frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} \psi + [\varepsilon - v_-(z)] \psi = 0 \quad (2.3)$$

nimmt das Potenzi al dann folgende Gestalt an:

$$v_-(z) = \frac{1}{2} \left\{ \eta^2 [\sinh(z) - \sinh(z_0)]^2 - 2\eta \cosh(z) + \eta \cosh(z_0) + \frac{1}{4} \right\} \quad (2.4)$$

mit der Konstanten  $z_0 = \alpha x_0$ .

Für die Symmetrie ergibt sich

$$v_-(-z) = \frac{1}{2} \left\{ \eta^2 [\sinh(z) + \sinh(z_0)]^2 - 2\eta \cosh(z) + \eta \cosh(z_0) + \frac{1}{4} \right\}. \quad (2.5)$$

Es ist also nur im Fall  $z_0 = 0$  die Bedingung  $v_-(-x) = v_-(x)$  für Achsensymmetrie bezüglich der Hochachse erfüllt.

Ausmultiplizieren und Anwenden der Additionstheoreme liefert

$$\begin{aligned} v_-(z) &= \frac{\eta^2}{4} [\cosh(2z) + \cosh(2z_0)] - \frac{\eta^2}{2} [\cosh(z + z_0) - \cosh(z - z_0)] \\ &\quad - \eta \cosh(z) + \frac{\eta}{2} \cosh(z_0) - \frac{\eta^2}{2} + \frac{1}{8}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Zunächst soll nur die symmetrische Form des Potenzi als betrachtet werden. Es wird untersucht, in welchen Fällen wirklich ein sog. Doppelmuldenpotenzi al vorliegt.

### 2.1.1 Der symmetrische Fall $z_0 = 0$

Im Fall einer Achsensymmetrie zur Hochachse gilt stets  $v'_-(0) = 0$ . Für die Existenz einer Doppelmulde wird gefordert, dass bei  $z = 0$  ein Maximum vorliegt, d. h. es muss  $v''_-(0) < 0$  erfüllt sein. Dies ist ebenfalls notwendige Voraussetzung dafür, dass  $v'_-(x)$  außer  $z = 0$  noch weitere reelle Nullstellen besitzt. Mit

$$\begin{aligned} v_-(z) &= \frac{1}{4}\eta^2 \cosh(2z) - \eta \cosh(z) - \frac{1}{4}\eta^2 + \frac{1}{2}\eta + \frac{1}{8} \\ v'_-(z) &= \frac{1}{2}\eta^2 \sinh(2z) - \eta \sinh(z) \\ v''_-(z) &= \eta^2 \cosh(2z) - \eta \cosh(z) \end{aligned} \quad (2.7)$$

nimmt obige Forderung die konkrete Form

$$v''_-(0) = \eta^2 - \eta < 0 \iff \eta < 1 \quad (2.8)$$

an. Der Doppelmuldencharakter des Potenzials ist also abhängig von  $\eta$  bzw. vom Verhältnis der beiden Parameter  $\alpha$  und  $A$ . Abbildung 4 zeigt Beispiele für die drei wichtigen Fälle  $\eta < 1$ ,  $\eta = 1$  und  $\eta > 1$ .

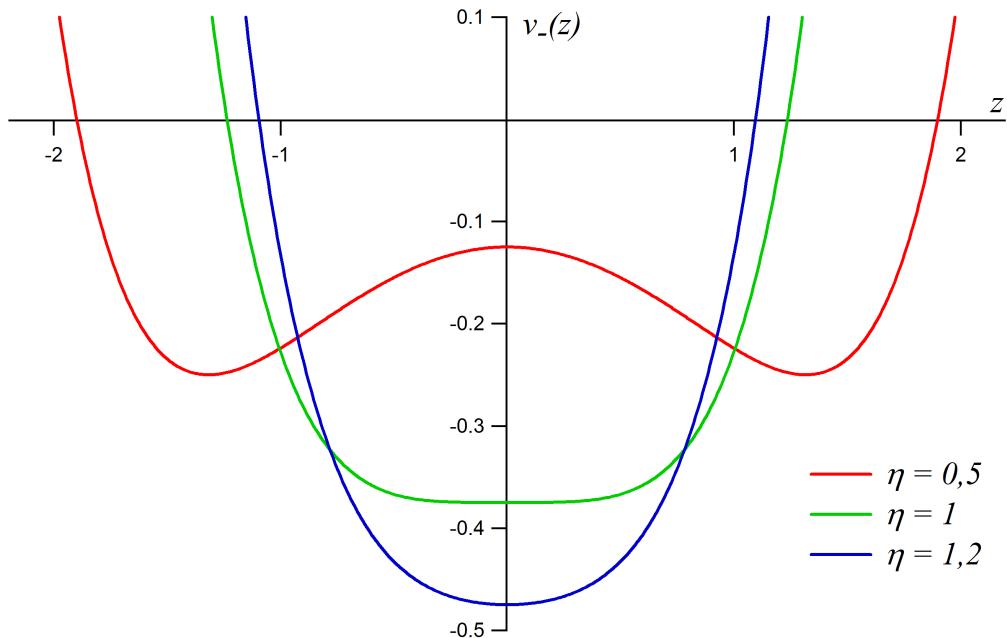


Abbildung 4:  $v_-(z)$  für verschiedene Werte von  $\eta$  bei  $z_0 = 0$ . Der Grenzfall  $\eta = 1$  liefert eine besonders flache Mulde.

Als nächstes ist die Lage der Mulden zu bestimmen. Es ergibt sich (nach erneuter An-

wendung der Additionstheoreme)

$$\begin{aligned}
 v'_-(z_M) &= \eta^2 \sinh(z_M) \cosh(z_M) - \eta \sinh(z_M) = 0 \\
 \iff \cosh(z_M) &= \frac{1}{\eta} \\
 \iff z_M &= \pm \operatorname{arccosh} \left( \frac{1}{\eta} \right).
 \end{aligned} \tag{2.9}$$

Nun wird die Verwandtschaft des Tkachuk-Potenzials (2.6) mit dem bekannten Razavy-Potenzial untersucht. Letzteres schreibt sich in den eingangs gewählten Einheiten

$$V_R(x) = \frac{\beta^2}{2} \left[ \frac{1}{8} \xi^2 \cosh(4\beta x) - (n+1)\xi \cosh(2\beta x) - \frac{1}{8} \xi^2 \right]. \tag{2.10}$$

Offensichtlich ist es achsensymmetrisch und kann daher nur einem Tkachuk-Potenzial für  $z_0 = 0$  entsprechen. Mit  $y = 2\beta x$  lautet es in dimensionsloser Form:

$$v_R(y) = \frac{1}{8} \left[ \frac{1}{8} \xi^2 \cosh(2y) - (n+1)\xi \cosh(y) - \frac{1}{8} \xi^2 \right]. \tag{2.11}$$

Zunächst werden beide Potenziale so verschoben, dass ihre Mulden auf Nullniveau liegen. Der Ort der Mulden des Tkachuk-Potenzials,  $z_M$ , ist in (2.9) angegeben, ihre Energie beläuft sich auf

$$\begin{aligned}
 v_-(z_M) &= \frac{\eta^2}{4} \cosh(2z_M) - \eta \cosh(z_M) + \frac{1}{8} + \frac{\eta}{2} - \frac{\eta^2}{4} \\
 &\stackrel{(2.9)}{=} \frac{\eta^2}{4} \left\{ \cosh^2 \left[ \operatorname{arccosh} \left( \frac{1}{\eta} \right) \right] + \sinh^2 \left[ \operatorname{arccosh} \left( \frac{1}{\eta} \right) \right] \right\} - 1 + \frac{1}{8} + \frac{\eta}{2} - \frac{\eta^2}{4} \\
 &= \frac{\eta^2}{4} \left\{ \frac{1}{\eta^2} + \sinh^2 \left[ \operatorname{arsinh} \left( \sqrt{\frac{1}{\eta^2} - 1} \right) \right] \right\} - \frac{7}{8} + \frac{\eta}{2} - \frac{\eta^2}{4} \\
 &= -\frac{3}{8} + \frac{\eta}{2} - \frac{\eta^2}{2}.
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

Das verschobene Potenzial ergibt sich dann zu

$$\begin{aligned}
 v_0(z) &= v_-(z) - v_-(z_M) = \frac{\eta^2}{4} \cosh(2z) - \eta \cosh(z) + \frac{1}{2} + \frac{\eta^2}{4} \\
 &= \frac{\eta^2}{4} \cosh^2(z) - \eta \cosh(z) + \frac{1}{2} + \frac{\eta^2}{4} [\sinh^2(z) + 1] \\
 &= \frac{1}{2} [\eta^2 \cosh^2(z) - 2\eta \cosh(z) + 1] \\
 &= \frac{1}{2} [\eta \cosh(z) - 1]^2.
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

Im Falle des Razavy-Potenzials erhält man durch analoges Vorgehen die Mulden

$$y_{M_R} = \pm \operatorname{arccosh} \left( \frac{2(n+1)}{\xi} \right) \tag{2.14}$$

## 2 Analyse der QES-Potenziale Tkachuks

---

mit der Energie

$$v_R(y_{M_R}) = -\frac{1}{8} \left( \frac{\xi^2}{4} + (n+1)^2 \right). \quad (2.15)$$

Damit ist das verschobene Razavy-Potenzial gegeben durch

$$v_{0_R}(y) = v_R(y) - v_R(y_{M_R}) = \frac{(n+1)^2}{8} \left[ \frac{\xi}{2(n+1)} \cosh(y) - 1 \right]^2. \quad (2.16)$$

Offensichtlich entspricht also das Tkachuk-Potenzial dem Razavy-Potenzial für  $n = 1$ , wenn man gleichzeitig

$$\eta = \frac{\xi}{4} \quad (2.17)$$

fordert. In dem Fall entsprechen sich auch die in [1] und [4] angeführten Werte für die Energiedifferenz der beiden untersten Eigenzustände. Beim Vergleich ist zu beachten, dass die Autoren der Artikel unterschiedliche Skalierungen und Einheitenkonventionen verwenden. Im System dieser Arbeit ist der Abstand jeweils mit

$$\Delta\varepsilon_T = \eta = \frac{\xi}{4} \quad (2.18)$$

anzugeben.

### 2.1.2 Der asymmetrische Fall $z_0 \neq 0$

Sei nun  $z_0 > 0$  und gleichzeitig  $\eta < 1$ . Aufgrund einer guten Anschaulichkeit soll nun das Potenzial aus (2.6) in eine Reihe entwickelt werden.

$$v_-(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} (2^{2k-2}\eta^2 - \eta) z^{2k} - \eta^2 \sinh(z_0) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)!} z^{2k+1}. \quad (2.19)$$

Man sieht deutlich, dass für  $z_0 \neq 0$  zu einem geraden Teil des Potenzials eine ungerade „Störung“ addiert wird. Die Koeffizienten

$$K'(k) = -\frac{\eta^2}{(2k+1)!} \sinh(z_0) \quad (2.20)$$

sind für jede Wahl von  $\eta$  negativ, d. h. der antisymmetrische Potenzialteil ist streng monoton fallend. Die Folge für das gesamte Potenzial ist, ausgehend vom symmetrischen Teil, eine Verschiebung der Potenziallinie nach oben im Bereich negativer  $z$  und eine Verschiebung nach unten für positive  $z$ , während  $v_-(0)$  unverändert bleibt. Das bedeutet einerseits den schon erwähnten Verlust der Achsensymmetrie, andererseits lässt sich demnach außer  $z_0 = 0$  kein weiteres Potenzial finden, bei dem die Mulden auf gleichem Niveau liegen.

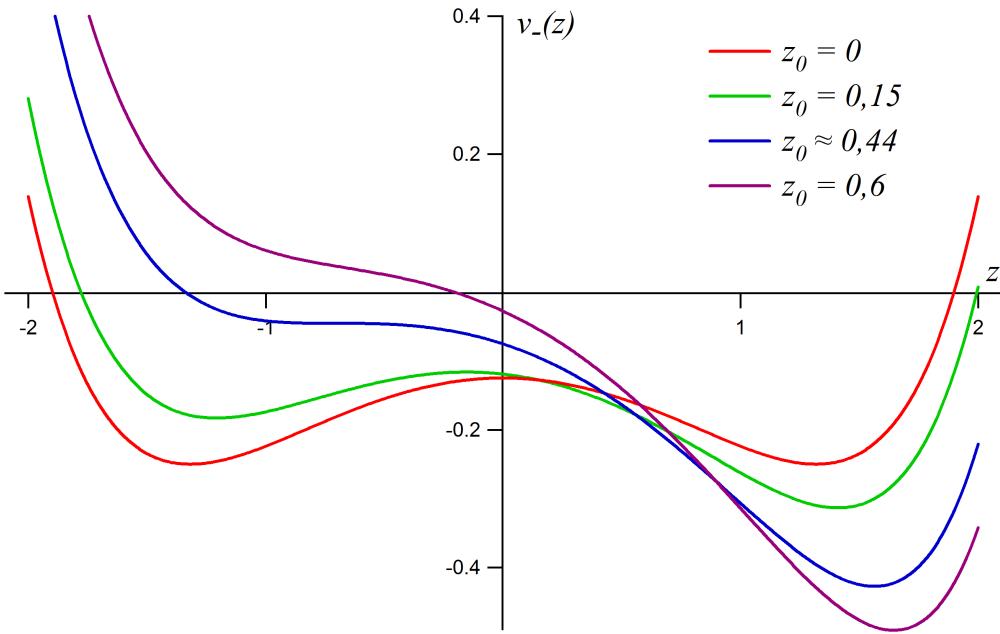


Abbildung 5:  $V_-(x)$  für  $\eta = \frac{1}{2}$  und verschiedene Werte von  $z_0$ ; bei  $z_0 > 0$  verschwindet die Achsensymmetrie, ab  $z_0 \approx 0,44$  auch die linke Mulde. Im Grenzfall liegt ein Sattelpunkt vor.

Jetzt ist zu untersuchen, für welche  $z_0$   $v_-(z)$  seinen Doppelmuldencharakter beibehält. Sei

$$v_-(z) = g(z) + \sinh(z_0) \cdot u(z) \quad (2.21)$$

die Darstellung von  $v_-(z)$  als Summe des geraden und ungeraden Anteils und  $z_M$  die Stelle der Mulden im symmetrischen Fall ( $z_0 = 0, v_-(z) = g(z)$ ). Dann gilt wegen der Symmetrieeigenschaften und der Monotonie des ungeraden Teils von  $v_-(z)$  für genügend kleine  $z_0$ :

$$v'_-(z_M) = \sinh(z_0) \cdot u'(z_M) < 0 \quad \text{und} \quad v'_-(0) = \sinh(z_0) \cdot u'(0) < 0. \quad (2.22)$$

Für wachsendes  $z_0$  verschieben sich also die Mulden zu höheren  $z$ -Werten, das lokale Maximum in der Mitte hingegen zu niedrigeren, bis bei einem bestimmten  $z_0$  linke Mulde und lokales Maximum zusammenfallen und somit eine der beiden Mulden verschwindet. Dieses  $z_0$  lässt sich analytisch nicht bestimmen, für  $\eta = \frac{1}{2}$  findet sich ein Wert von  $z_0 \approx 0,436$ . Zur Veranschaulichung diene Abbildung 5.

Wegen  $\sinh(-z_0) = -\sinh(z_0)$  entnimmt man (2.19), dass für negative  $z_0$  die gleichen Überlegungen gelten, wenn man das Potenzial an der Hochachse spiegelt.

## 2.2 Beispiel 2

Als zweites soll das Potenzial

$$V_-(x) = \frac{1}{8c^2} \left( \frac{(b^2 - c^2)(A + \alpha c)(A + 3\alpha c)}{[b + c \cosh(\alpha x)]^2} - \frac{2b(A + \alpha c)^2}{b + c \cosh(\alpha x)} \right. \\ \left. + \frac{\alpha^2 b c^3}{(b + c)^2} \frac{1}{\cosh^2(\alpha x/2)} + \frac{(\alpha c^2 + A(b + c))^2}{(b + c)^2} \right) \quad (2.23)$$

behandelt werden. Für die Parameter wird  $A, \alpha, c > 0$  und  $b + c > 0$  gefordert. Die Achsensymmetrie ist leicht ersichtlich, da  $x$  nur in Form von geraden hyperbolischen Kosinusfunktionen eingeht. Unter Verwendung von

$$\cosh^2(\alpha x/2) = \frac{1}{2}[\cosh(\alpha x) + 1] \quad (2.24)$$

kommt man auf den Ausdruck

$$V_-(x) = \frac{1}{8c^2} \left( \frac{(b^2 - c^2)(A + \alpha c)(A + 3\alpha c)}{[b + c \cosh(\alpha x)]^2} - \frac{2b(A + \alpha c)^2}{b + c \cosh(\alpha x)} \right. \\ \left. + \frac{2\alpha^2 b c^3}{(b + c)^2} \frac{1}{[1 + \cosh(\alpha x)]} + \frac{(\alpha c^2 + A(b + c))^2}{(b + c)^2} \right). \quad (2.25)$$

Auch hier kann durch entsprechende Substitutionen ein Parameter eliminiert werden.  $b$  und  $c$  sind bereits dimensionslos,  $\alpha$  und  $A$  sind verwandt mit den gleichnamigen Parametern aus Abschnitt 2.1. Es ist naheliegend, analog zum vorangegangenen Beispiel die neuen Variablen gemäß (2.2) zu wählen. Es ergibt sich

$$v_-(z) = \frac{1}{8c^2} \left( \frac{(b^2 - c^2)(2\eta + c)(2\eta + 3c)}{[b + c \cosh(z)]^2} - \frac{2b(2\eta + c)^2}{b + c \cosh(z)} \right. \\ \left. + \frac{2bc^3}{(b + c)^2} \frac{1}{[1 + \cosh(z)]} + \frac{(c^2 + 2\eta(b + c))^2}{(b + c)^2} \right). \quad (2.26)$$

Weiter ist zu bemerken, dass dieses Potenzial eine Verallgemeinerung des bereits besprochenen Potenzials Tkachuks darstellt. Vergleicht man die ursprünglichen Superpotenziale beider Beispiele, (1.33) und (1.39), so stellt man fest, dass im Limes  $c \rightarrow 0$  und für  $b = 1$  wieder das Potenzial aus dem ersten Beispiel erhalten werden muss. Tatsächlich geht im angesprochenen Grenzfall (2.26) in (2.4) (für  $z_0 = 0$ ) über. Die Auswertung dieses Grenzfalles ist durchaus nicht trivial, es bleiben Teile mehrerer der Summanden aus (2.26) übrig, deren Grenzverhalten nur mithilfe des Satzes von de l'Hospital untersucht werden kann. An dieser Stelle kann man durch zwei weitere Ersetzungen zusätzlich einen Parameter einsparen. Dazu setzt man

$$c \equiv \eta\gamma \quad \text{und} \quad b \equiv \frac{\eta\gamma}{\beta}, \quad (2.27)$$

so dass das Potenzial die folgende Gestalt annimmt:

$$v_-(z) = \frac{1}{8\gamma^2} \left( \frac{(1 - \beta^2)(2 + \gamma)(2 + 3\gamma)}{[1 + \beta \cosh(z)]^2} - \frac{2(2 + \gamma)^2}{1 + \beta \cosh(z)} \right. \\ \left. + \frac{2\beta\gamma^2}{(1 + \beta)^2} \frac{1}{[1 + \cosh(z)]} + \frac{(\beta\gamma + 2(1 + \beta))^2}{(1 + \beta)^2} \right). \quad (2.28)$$

Wegen  $c, \eta > 0$  gilt auch  $\gamma > 0$ . Anstelle von  $c \rightarrow 0$  und  $b = 1$  kann man analog den Limes  $\beta, \gamma \rightarrow 0$  bilden. Da aber der Parameter  $\eta$  eliminiert wurde, haben die entsprechenden Ausdrücke nur bedingt die Gestalt aus Abschnitt 2.1.

Im Gegensatz zum vorher Besprochenen geht dieses Potenzial für große  $z$  asymptotisch gegen einen festen Wert:

$$v_-(z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} \frac{1}{8} \left( \frac{\gamma\beta + 2(1+\beta)}{\gamma(1+\beta)} \right)^2. \quad (2.29)$$

Zur Bestimmung der Bedingungen an die Parameter für das Vorliegen eines Doppelnullpunkttyps wird wieder die zweite Ableitung des Potenzials benötigt. Es ist

$$\begin{aligned} v'_-(z) = \frac{\beta}{4\gamma^2} & \left( -\sinh(z) \frac{(1-\beta^2)(2+\gamma)(2+3\gamma)}{[1+\beta \cosh(z)]^3} + \frac{\sinh(z)(2+\gamma)^2}{[1+\beta \cosh(z)]^2} \right. \\ & \left. - \frac{\gamma^2 \sinh(z)}{(1+\beta)^2} \frac{1}{[1+\cosh(z)]^2} \right) \end{aligned} \quad (2.30)$$

und

$$\begin{aligned} v''_-(z) = \frac{\beta}{4\gamma^2} & \left( [2\beta \cosh^2(z) - \cosh(z) - 3\beta] \frac{(1-\beta^2)(2+\gamma)(2+3\gamma)}{[1+\beta \cosh(z)]^4} \right. \\ & - [\beta \cosh^2(z) - \cosh(z) - 2\beta] \frac{(2+\gamma)^2}{[1+\beta \cosh(z)]^3} \\ & \left. + \frac{\gamma^2}{(1+\beta)^2} \frac{\cosh^2(z) - \cosh(z) - 2}{[1+\cosh(z)]^3} \right). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Es muss gelten:

$$\begin{aligned} v''_-(0) < 0 & \iff \frac{\beta}{4\gamma^2} \left( -\frac{(1-\beta^2)(2+\gamma)(2+3\gamma)}{(1+\beta)^3} + \frac{(2+\gamma)^2}{(1+\beta)^2} - \frac{\gamma^2}{4(1+\beta)^2} \right) < 0 \\ & \iff -4(1-\beta)(2+\gamma)(2+3\gamma) + 4(2+\gamma)^2 - \gamma^2 < 0 \\ & \iff 4\beta(3\gamma^2 + 8\gamma + 4) < \gamma(16 + 9\gamma) \\ & \iff \beta < \frac{\gamma(16 + 9\gamma)}{4(2+\gamma)(2+3\gamma)}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Wegen  $\gamma > 0$  gilt (wie bereits in der vorangegangenen Rechnung angenommen) auch  $\beta > 0$ , denn für ein  $\beta < 0$  ergäbe sich entsprechend

$$0 > \beta > \frac{\gamma(16 + 9\gamma)}{4(2+\gamma)(2+3\gamma)}, \quad (2.33)$$

was eben aufgrund von  $\gamma > 0$  nicht möglich ist. Weiterhin liest man leicht aus (2.32) ab, dass  $\beta < 1$  für jedes erlaubte  $\gamma$  gilt.

## 2 Analyse der QES-Potenziale Tkachuks

---

Nun soll versucht werden, die Lage der Mulden des Potenzials zu bestimmen. Es findet sich mit (2.30) nach Herauskürzen von Vorfaktoren und der  $\sinh(z)$ , die die „triviale“ Nullstelle bei  $z = 0$  verursachen:

$$-\frac{(1 - \beta^2)(2 + \gamma)(2 + 3\gamma)}{[1 + \beta \cosh(z)]^3} + \frac{(2 + \gamma)^2}{[1 + \beta \cosh(z)]^2} - \frac{\gamma^2}{(1 + \beta)^2} \frac{1}{[1 + \cosh(z)]^2} \stackrel{!}{=} 0. \quad (2.34)$$

Erweitern der Brüche und Umstellen liefert schließlich folgende Gleichung:

$$\begin{aligned} & [\gamma^2(2\beta^2 + \beta) + 4\beta(\gamma + 1)(1 + \beta)^2] \cdot y^3 \\ & + [\gamma^2(3\beta^4 + 8\beta^3 + 2\beta^2 - 2\beta - 2) + 4\gamma(\beta^2(2 + \beta)^2 - 1) + 4\beta(1 + \beta)^2(2 + \beta)] \cdot y^2 \\ & + [\gamma^2(6\beta^4 + 13\beta^3 + 4\beta^2 - 10\beta - 4) + 4\gamma(1 + \beta)^2(4\beta^2 + \beta - 2) + 4\beta(1 + \beta)^2(2\beta + 1)] \cdot y \\ & + \gamma^2(6\beta^4 + 13\beta^3 + 4\beta^2 - 10\beta - 4) + 4\gamma(1 + \beta)^2(4\beta^2 + \beta - 2) + 4\beta(1 + \beta)^2(2\beta + 1) = 0. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Darin ist  $y = \cosh(z)$ . Die Gleichung ist dritten Grades in  $y$  und damit analytisch lösbar, jedoch sind die Ausdrücke für die Nullstellen derart lang, dass sie sich kaum zur weiteren Analyse anbieten. Es gibt im Falle eines Doppelmuldenpotenzials (also bei entsprechenden Bedingungen, die die Parameter erfüllen) eine reelle und zwei komplexe Nullstellen. Die reelle gibt die Lage der Mulden an und sei mit  $y_0$  bezeichnet. Es ist

$$z_M = \pm \text{arcosh}(y_0). \quad (2.36)$$

Bei diesem Potenzial kann der Fall vorliegen, dass die mittige Barriere den endlichen Rand überragt. Die dafür an die Parameter zu stellenden Bedingungen sind Gegenstand der folgenden Untersuchung.

Erfüllen muss sich logischerweise

$$v_-(0) - v_-(z \rightarrow \infty) > 0, \quad (2.37)$$

was auf

$$\begin{aligned} & \frac{1 - \beta}{1 + \beta}(2 + \gamma)(2 + 3\gamma) - \frac{2(2 + \gamma)^2}{1 + \beta} + \frac{\beta\gamma^2}{(1 + \beta)^2} > 0 \\ \iff & (1 - \beta^2)(2 + \gamma)(2 + 3\gamma) - 2(1 + \beta)(2 + \gamma)^2 + \beta\gamma^2 > 0 \end{aligned} \quad (2.38)$$

führt. Letztere Gleichung hat die Lösung

$$-\frac{\gamma\sqrt{13\gamma^2 + 48\gamma + 48} + \gamma^2 + 8\gamma + 8}{2(\gamma + 2)(3\gamma + 2)} < \beta < \frac{\gamma\sqrt{13\gamma^2 + 48\gamma + 48} - \gamma^2 - 8\gamma - 8}{2(\gamma + 2)(3\gamma + 2)}. \quad (2.39)$$

Wie in Abbildung 6 illustriert, muss  $\beta$  für ein entsprechendes  $\gamma$  im Bereich zwischen den beiden rot eingezeichneten Kurven liegen.

Da für die Doppelmuldenform, wie gesagt,  $\beta > 0$  gefordert ist, beschränkt sich der Wertebereich von  $\beta$  in Abhängigkeit von  $\gamma$  auf die schraffierte Fläche. Die gestrichelte Kurve stellt nach (2.32) die Obergrenze für  $\beta$  dar. Für  $\gamma \leq 2$  kann die Barriere nicht höher als der Rand liegen. Je kleiner  $\beta$  für gegebenes  $\gamma$  ist, desto weiter überragt die Barriere den Potenzialrand, desto breiter wird sie und desto stärker abgeflacht.

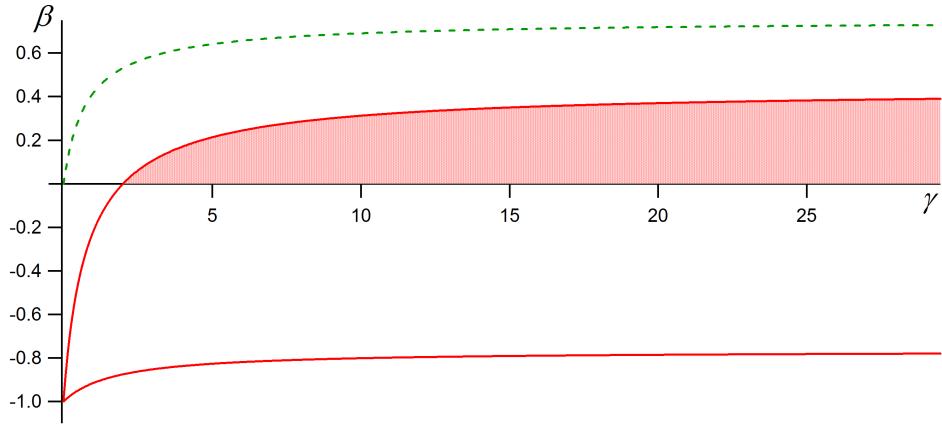


Abbildung 6: Zur Bedingung für eine den Potenzialrand überragende Barriere.

Abbildung 7 zeigt das Potenzial für zwei verschiedene Werte von  $\beta$ .

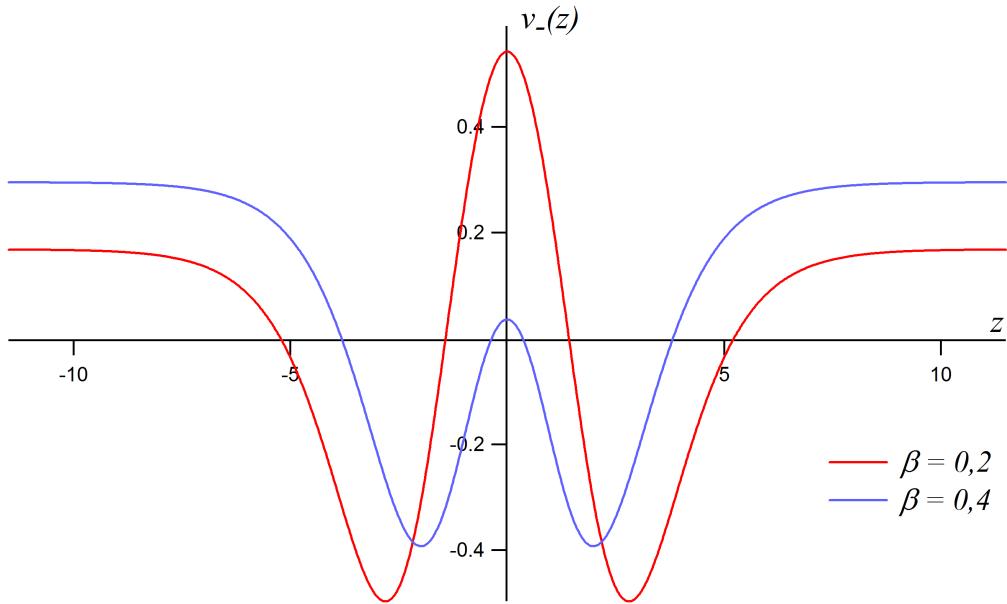


Abbildung 7:  $v_-(z)$  für  $\gamma = 10$  und verschiedene Werte von  $\beta$ ;  $\beta = 0,2$  liegt innerhalb des schraffierten Bereiches in Abbildung 6, die Barriere überragt den Rand.

## 2.3 Beispiel 3

Als drittes Beispiel für ein QES-Potenzial gibt Tkachuk

$$V_-(x) = \frac{1}{8}(a^2 - 12b)x^2 + \frac{1}{4}abx^4 + \frac{1}{8}b^2x^6 + \frac{3ab}{8(a + bx^2)^2} + \frac{3b}{8(a + bx^2)} - \frac{1}{4}a \quad (2.40)$$

## 2 Analyse der QES-Potenziale Tkachuks

---

mit  $a, b > 0$  an. Die Achsensymmetrie festzustellen, ist trivial. Wiederum eliminiert eine Reskalierung einen Parameter und schafft bessere Übersicht:

$$y = \sqrt{\frac{b}{a}} x \quad \text{und} \quad \zeta = \frac{a^2}{b}. \quad (2.41)$$

Das Potenzial in der dimensionslosen Schrödingergleichung (vgl. (2.3)) liest sich dann:

$$v_-(y) = \frac{1}{8}(\zeta^2 - 12\zeta)y^2 + \frac{1}{4}\zeta^2 y^4 + \frac{1}{8}\zeta^2 y^6 + \frac{3}{8(1+y^2)^2} + \frac{3}{8(1+y^2)} - \frac{1}{4}\zeta. \quad (2.42)$$

Für spätere Zwecke sei auch noch die Reihenentwicklung angegeben:

$$\begin{aligned} v_-(y) = & -\frac{1}{4}\zeta + \frac{3}{4} + \left[ \frac{1}{8}(\zeta^2 - 12\zeta) - \frac{9}{8} \right] y^2 + \left[ \frac{1}{4}\zeta^2 + \frac{3}{2} \right] y^4 + \left[ \frac{1}{8}\zeta^2 - \frac{15}{8} \right] y^6 \\ & + \frac{3}{8} \sum_{k=4}^{\infty} (k+2)(-1)^k y^{2k}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Soll ein Doppelmuldentyp vorliegen, so muss wieder  $v''_-(0) < 0$  gelten. An dieser Stelle nutzen wir die Reihenentwicklung aus. Die entsprechende Forderung lautet dann, dass der Koeffizient der Ordnung  $y^2$  negativ sein muss. Dies führt auf die Ungleichung

$$\begin{aligned} \frac{1}{8}(\zeta^2 - 12\zeta) - \frac{9}{8} & < 0 \\ \zeta^2 - 12\zeta - 9 & < 0 \\ \zeta & < \sqrt{45} + 6 \approx 12,7, \end{aligned} \quad (2.44)$$

die demnach das Kriterium für das Vorliegen einer Doppelmulde ist. Anschauung dazu bietet Abbildung 8.

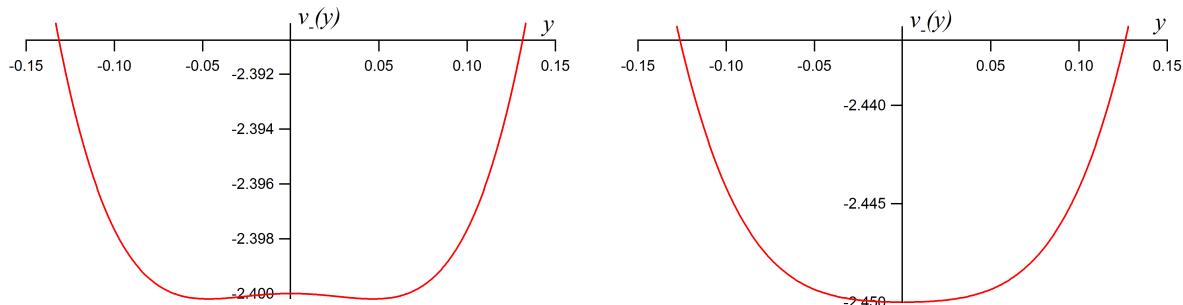


Abbildung 8:  $v_-(z)$  für  $\zeta = 12,6$  (links) und  $\zeta = 12,8$  (rechts); da der Quotient dicht am Schwellenwert liegt, sind die Mulden äußerst flach.

Die zweite Lösung für  $\zeta$  ist negativ und somit nicht zulässig.

Die Minima des Potenzials werden wieder mithilfe der ersten Ableitung bestimmt:

$$v'_-(y) = \frac{1}{4}(\zeta^2 - 12\zeta)y + \zeta^2 y^3 + \frac{3}{4}\zeta^2 y^5 - \frac{3y}{2(1+y^2)^3} - \frac{3y}{4(1+y^2)^2}. \quad (2.45)$$

Nach Erweitern der Brüche und Herauskürzen der trivialen Nullstelle  $y = 0$  bleibt folgende Gleichung zu lösen:

$$\begin{aligned} 3\zeta^2 y^{10} + 13\zeta^2 y^8 + 2\zeta(11\zeta - 6)y^6 + 18\zeta(\zeta - 2)y^4 + (7\zeta^2 - 36\zeta - 3)y^2 \\ = -\zeta^2 + 12\zeta + 9. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Diese Gleichung lässt sich durch Substitution  $t = y^2 + 1$  auf eine einfachere Gleichung fünften Grades bringen:

$$3\zeta^2 t^5 - 2\zeta^2 t^4 - 12\zeta t^3 - 3t - 6 = 0. \quad (2.47)$$

Die Nullstellen entziehen sich dennoch dem analytischen Zugriff, auch mit „Mathematica“ konnte kein Ergebnis erzielt werden. Wohl lässt sich (2.47) nach  $\zeta$  auflösen:

$$\zeta = \frac{\sqrt{45t^2 + 12t - 12} \pm 6t}{t(2 - 3t)}. \quad (2.48)$$

Für  $t = 1$ , also  $y = 0$ , ist  $\zeta = 6 + \sqrt{45}$ . Es handelt sich um die Grenze zum Doppelmuldencharakter und die Potenzialableitung hat nur reelle Nullstellen bei  $y = 0$ . Aber man erhält auch im Fall  $t = 2$  bzw.  $y = \pm 1$  mit  $\zeta = \frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{3}{4}$  ein „übersichtliches“ Resultat. D. h. für solche Wahl des Parameters liegen die Potenzialmulden auf  $y = 1$  und  $y = -1$ . Das so geschaffene parameterlose Potenzial lässt sich problemlos auf Nullniveau verschieben und hat dort die Form

$$v_0^1(y) = \frac{3(y+1)^2(y-1)^2[(4\sqrt{3}+7)y^6 + (24\sqrt{3}+42)y^4 + (36\sqrt{3}+71)y^2 + 16\sqrt{3}+40]}{128(y^2+1)^2}. \quad (2.49)$$

Dieser Ausdruck eignet sich allerdings nicht, um ihn später im Rahmen der Berechnung der Energieaufspaltung zu verwenden, da die Quadratwurzel sich nur teilweise explizit ziehen lässt.

Eine andere Möglichkeit ist, das Potenzial nur bis zur 4. Ordnung seiner Potenzreihenentwicklung zu verwenden:

$$\tilde{v}(y) = -\frac{1}{4}\zeta + \frac{3}{4} + \left[ \frac{1}{8}(\zeta^2 - 12\zeta) - \frac{9}{8} \right] y^2 + \left[ \frac{1}{4}\zeta^2 + \frac{3}{2} \right] y^4. \quad (2.50)$$

Eine Aussage darüber, für welche  $\zeta$  diese Approximation gut ist, lässt sich mit folgender Abschätzung machen:

Die Differenzenfunktion von exaktem und genähertem Potenzial ist gegeben durch

$$f(y) = \frac{9}{8}y^2 - \frac{3}{2}y^4 + \frac{1}{8}\zeta y^6 + \frac{3}{8(1+y^2)^2} + \frac{3}{8(1+y^2)} - \frac{3}{4}. \quad (2.51)$$

## 2 Analyse der QES-Potenziale Tkachuks

---

Sie sollte auf einem gewissen Intervall um  $y = 0$  möglichst wenig von 0 abweichen. Als Maß dafür kann man das Integral über diesem Intervall nehmen und untersuchen, für welches  $\zeta$  sich der Betrag dieses Integrals minimiert:

$$A(\zeta, \varepsilon) = \left| \int_0^\varepsilon dy f(y) \right| = \left| \frac{9}{16} \arctan(\varepsilon) + \frac{\zeta^2}{56} \varepsilon^2 - \frac{3}{10} \varepsilon^5 + \frac{3}{8} \varepsilon^3 - \frac{3}{4} \varepsilon + \frac{3\varepsilon}{16(\varepsilon^2 + 1)} \right|. \quad (2.52)$$

Eine sinnvolle Intervallgrenze scheint  $\varepsilon = 1$  zu sein, da etwa dort die Potenzialmulden liegen, wenn  $\zeta$  sich seinem Idealwert annähert und die beiden Potenziale nach optischer Abschätzung gut übereinstimmen. Dann nimmt auch der obige Ausdruck eine einfache Form an:

$$A(\zeta, 1) = \left| \frac{\zeta^2}{56} + \frac{9\pi}{64} - \frac{93}{160} \right|. \quad (2.53)$$

$A(\zeta, 1)$  verschwindet für

$$\zeta^* = \frac{\sqrt{210(62 - 15\pi)}}{20} \approx 2,79 \quad (2.54)$$

und ist dort minimal. Der Wert entspricht relativ gut dem zuvor graphisch grob gesuchten. (s. Abb. 9) Bis etwas über die Mulden hinaus stimmen die beiden Potenziale  $v_-(y)$  und  $\tilde{v}(y)$  gut überein, danach machen sich in  $\tilde{v}(y)$  die fehlenden höheren Potenzen von  $y$  bemerkbar.

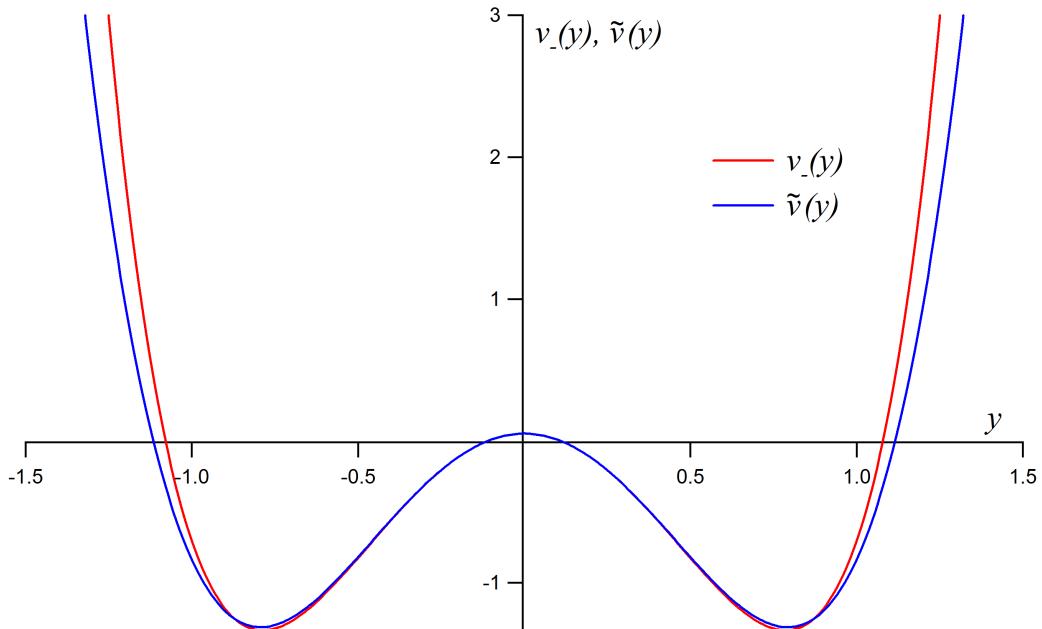


Abbildung 9:  $v_-(y)$  (rot) und  $\tilde{v}(y)$  (blau) für  $\zeta = \zeta^* = 2,79$ .

Es wird also das Potenzial (2.50) behandelt. Es ist

$$\tilde{v}'(y) = \left[ \frac{1}{4}(\zeta^2 - 12\zeta) - \frac{9}{4} \right] x + [\zeta^2 + 6] x^3, \quad (2.55)$$

und neben  $y = 0$  finden sich die Nullstellen

$$y_M = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{-\zeta^2 + 12\zeta + 9}{\zeta^2 + 6}}. \quad (2.56)$$

(2.44) garantiert, dass  $y_M$  reell ist und somit eine Doppelmulde existiert. Die energetische Lage der Mulden ergibt sich zu

$$\tilde{v}(y_M) = -\frac{\zeta^4 - 8\zeta^3 + 78\zeta^2 + 312\zeta - 207}{64(\zeta^2 + 6)}. \quad (2.57)$$

Für spätere Zwecke wird auch der Ausdruck für das auf Nullniveau verschobene Potenzial angegeben. Man erhält

$$\begin{aligned} \tilde{v}_0(y) &= \tilde{v}(y) - \tilde{v}(y_M) = \frac{1}{4}(\zeta^2 + 6)y^4 - \frac{1}{8}(-\zeta^2 + 12\zeta + 9)y^2 + \frac{(-\zeta^2 + 12\zeta + 9)^2}{64(\zeta^2 + 6)} \\ &= \left( \frac{1}{2} \sqrt{\zeta^2 + 6} y^2 - \frac{-\zeta^2 + 12\zeta + 9}{8\sqrt{\zeta^2 + 6}} \right)^2 \\ &= \frac{(-\zeta^2 + 12\zeta + 9)^2}{64(\zeta^2 + 6)} \left( \frac{4(\zeta^2 + 6)}{-\zeta^2 + 12\zeta + 9} y^2 - 1 \right)^2. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Es sei auf die formale Ähnlichkeit zum verschobenen Potenzial aus Beispiel 1 hingewiesen, in dem anstelle von  $y^2$  der ebenfalls gerade Kosinus hyperbolicus auftritt.

## 2.4 Beispiel 4

Viertes und letztes Beispiel der zitierten Veröffentlichung ist das augenfällig achsensymmetrische Potenzial

$$V_-(x) = \frac{1 - A^2 b^2}{8(b^2 + x^2)} - \frac{Ab^2}{2(b^2 + x^2)^{\frac{3}{2}}} - \frac{5b^2}{8(b^2 + x^2)^2} + \frac{(1 + Ab)^2}{8b^2} \quad (2.59)$$

mit der entsprechenden Potenzreihenform

$$\begin{aligned} V_-(x) &= \frac{(1 + Ab)^2}{8b^2} \\ &+ \frac{1}{2b} \sum_{k=0}^{\infty} \left[ \frac{(1 - A^2 b^2)}{4b} - A \frac{(2k+1)(2k-1) \cdot \dots \cdot 1}{2k(2k-2) \cdot \dots \cdot 2} - \frac{5(k+1)}{4b} \right] (-1)^k \left( \frac{x}{b} \right)^{2k}. \end{aligned} \quad (2.60)$$

## 2 Analyse der QES-Potenziale Tkachuks

---

Das bekannte Prozedere für den Koeffizienten der zweiten Ordnung liefert

$$\frac{(Ab + 3)^2}{8b^4} < 0, \quad (2.61)$$

was für kein Paar reeller Parameter  $A$  und  $b$  erfüllt ist. Somit ist das vorliegende Potenzial nicht vom Doppelmuldentyp, vielmehr liegt eine einzelne Mulde vor, und für  $x \rightarrow \infty$  nimmt das Potenzial den endlichen Wert  $\frac{(1+Ab)^2}{8b^2}$  an.

### 3 Die Energien des ersten angeregten Zustands

Der energetische Abstand zwischen Grundzustand und erstem angeregten Zustand ist von besonderem Interesse. In den eingangs ausgeführten Grundlagen tauchen zwei verschiedene Ausdrücke für diese Energiedifferenz auf. Zum einen enthält Tkachuks Konstruktionsmethode für quasixakt lösbar Potenziale einen direkten, wenn auch noch parameterabhängigen Ausdruck für die Energie des ersten angeregten Zustands, der wegen der auf Null gelegten Energie des Grundzustands auch der Energiedifferenz entspricht. Andererseits ist näherungsweise ein Zugang gegeben durch den Ansatz mit der Tunnelwahrscheinlichkeit. Für die beiden Potenziale aus den Abschnitten 2.1.1 und 2.3, deren Muldenenergie bestimmt wurde und die infolge dessen genau auf Nullniveau verschoben werden konnten, lässt sich nun die genäherte Energiedifferenz bis auf einen Vorfaktor ermitteln. Diese gilt es schließlich, mit dem exakten Wert, den Tkachuk liefert, zu vergleichen.

#### 3.1 Zu Beispiel 1

Im ersten Fall wurde das folgende verschobene Potenzial gefunden:

$$v_0(z) = \frac{1}{2} [\eta \cosh(z) - 1]^2. \quad (3.1)$$

Die Gleichung für die Energiedifferenz der beiden untersten Zustände war gegeben durch

$$\Delta E \approx 2K \cdot \exp \left( - \int_{-x_M}^{x_M} dx \sqrt{2mV(x)} \right), \quad (3.2)$$

$-x_M$  und  $x_M$  waren darin die Ortskoordinaten der Mulden. Zunächst wird das Wirkungsintegral im Exponenten für das obige Potenzial ausgewertet. Beim Ziehen der Wurzel ist das Vorzeichen so zu wählen, dass der Integrand auf dem betrachteten Intervall positiv ist. Es gilt wieder die Konvention  $m = 1$ , so dass sich mit den dimensionslosen Variablen nachfolgende Rechnung ergibt:

$$\begin{aligned} S_E(\eta) &= \int_{-z_M}^{z_M} dz [1 - \eta \cosh(z)] = [z - \eta \sinh(z)]_{-z_M}^{z_M} \\ &\stackrel{(2.9)}{=} 2 \operatorname{arcosh} \left( \frac{1}{\eta} \right) - 2\eta \sinh \left[ \operatorname{arcosh} \left( \frac{1}{\eta} \right) \right] \\ &= 2 \operatorname{arcosh} \left( \frac{1}{\eta} \right) - 2\eta \sqrt{\frac{1}{\eta^2} - 1} \\ &= 2 \ln \left( \frac{1}{\eta} + \sqrt{\frac{1}{\eta^2} - 1} \right) - 2\sqrt{1 - \eta^2}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Der vollständige Ausdruck für den Energieabstand wird dann zu

$$\begin{aligned} \Delta \varepsilon &= 2k \cdot \exp \left[ 2\sqrt{1 - \eta^2} - 2 \ln \left( \frac{1}{\eta} + \sqrt{\frac{1}{\eta^2} - 1} \right) \right] \\ &= 2k \left( \frac{1}{\eta} + \sqrt{\frac{1}{\eta^2} - 1} \right)^{-2} \cdot e^{2\sqrt{1 - \eta^2}}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

### 3 Die Energien des ersten angeregten Zustands

---

Hierin ist  $k$  der in (1.61) auftretende Vorfaktor  $K$  in der angepassten, dimensionsfreien Gestalt. Der bei Tkachuk angegebene exakte Wert ist

$$\Delta E_T = \frac{1}{2} \alpha A \quad (3.5)$$

(vgl. mit (1.35) bei  $x_0 = 0$ ). Dem entspricht, wie bereits in Abschnitt 2.1.1 erwähnt, im hier verwendeten, einheitenfreien System

$$\Delta \varepsilon_T = \eta. \quad (3.6)$$

Für einen tiefergehenden Vergleich beider Ausdrücke ist die Kenntnis der genauen Gestalt von  $k$  nötig. Deren Bestimmung übersteigt jedoch den Umfang dieser Arbeit. Trotzdem sollen an dieser Stelle die beiden Resultate, bis auf den Vorfaktor, graphisch veranschaulicht werden (s. Abb. 10). Die aus den Wurzeltermen entstehenden Anforderungen an  $\eta$  für den reellen Charakter des gesamten Ausdrucks decken sich mit (2.8). Man beobachtet einen durchaus vergleichbaren Verlauf beider Kurven. Dennoch ist ihr Abstand nicht konstant, d. h. für eine genauere Übereinstimmung der beiden Kurven kann  $k$  keine Konstante sein, sondern muss ebenfalls von  $\eta$  abhängen.

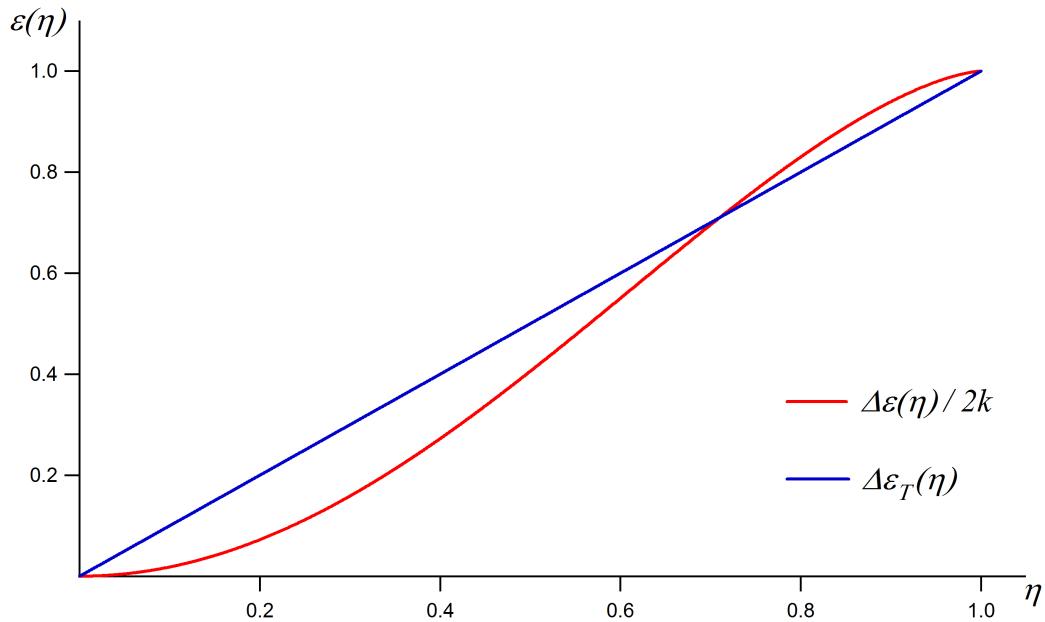


Abbildung 10: Verlauf der dimensionslosen Energiedifferenzen, das exakte Verhalten ist die blaue Linie.

Nach [2] ist die semiklassische Approximation umso besser, je größer der Betrag des Wirkungsterms in der Exponentialfunktion in (1.61) ist. Der Wirkungsterm ist in jedem Falle positiv und geht mit negativem Vorzeichen ein, so dass bei kleinstem Einfluss der Exponentialfunktion die Güte der Näherung am größten wird. Demnach müsste sich

in Abbildung 10 die Übereinstimmung der beiden Kurven für kleines  $\eta$  verbessern. Dies ist nicht zu beobachten, allerdings ist aufgrund des unbekannten Faktors  $k$  ein aussagekräftiger Vergleich nur beschränkt möglich. Für  $\eta \rightarrow 0$  ist

$$\frac{\Delta\varepsilon(\eta)}{2k} \propto \frac{e^2}{4}\eta^2, \quad (3.7)$$

es ist also dementsprechend ein  $k$  zu erwarten, das im besagten Grenzfall mit  $\frac{1}{\eta}$  geht, so dass der vollständige approximierte Ausdruck wie die exakte Lösung ein lineares Verhalten aufweist.

## 3.2 Zu Beispiel 3

Ein zweiter Vergleich soll nun mit dem verschobenen Näherungspotenzial aus (2.58),

$$\tilde{v}_0(y) = \frac{(-\zeta^2 + 12\zeta + 9)^2}{64(\zeta^2 + 6)} \left( \frac{4(\zeta^2 + 6)}{-\zeta^2 + 12\zeta + 9} y^2 - 1 \right)^2, \quad (3.8)$$

angestellt werden. Zunächst wird, wie gehabt, das in (1.61) auftretende Wirkungsintegral berechnet, wobei die in (2.56) ermittelten Minima des Potenzials als Integrationsgrenzen verwendet werden:

$$\begin{aligned} S_E(\zeta) &= \sqrt{2} \frac{\zeta^2 - 12\zeta - 9}{8\sqrt{\zeta^2 + 6}} \int_{-y_M}^{y_M} dy \left( \frac{4(\zeta^2 + 6)}{-\zeta^2 + 12\zeta + 9} y^2 - 1 \right) \\ &\stackrel{(2.56)}{=} \sqrt{2} \frac{\zeta^2 - 12\zeta - 9}{8\sqrt{\zeta^2 + 6}} \cdot 2 \cdot \left( -\sqrt{\frac{-\zeta^2 + 12\zeta + 9}{36(\zeta^2 + 6)}} + \sqrt{\frac{(-\zeta^2 + 12\zeta + 9)}{b(\zeta^2 + 6)}} \right) \\ &= \frac{\sqrt{2}}{12} \frac{(-\zeta^2 + 12\zeta + 9)^{\frac{3}{2}}}{(\zeta^2 + 6)}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Bei der Bestimmung des Vorfaktors  $K$  kann man auf [2] zurückgreifen. Dort wird beispielhaft das Potenzial

$$V_M(x) = \lambda(x^2 - \alpha^2)^2 \quad (3.10)$$

behandelt und der entsprechende Vorfaktor mit

$$K_M = \sqrt{\frac{(8\lambda\alpha^2)^{\frac{5}{2}}}{2\pi\lambda}} \quad (3.11)$$

angegeben. (Es wurde wiederum die Konvention  $m = 1$  verwendet). Da das hier behandelte Potenzial die gleiche Form hat, lässt sich in diesem Fall ohne größeren Aufwand ein Ausdruck für  $K$  bzw. ein dimensionsfreies  $k$  finden. Mit

$$\tilde{v}_0(y) = \frac{\zeta^2 + 6}{4} \left( y^2 - \frac{-\zeta^2 + 12\zeta + 9}{4(\zeta^2 + 6)} \right)^2 \quad (3.12)$$

### 3 Die Energien des ersten angeregten Zustands

---

sowie den Identifizierungen

$$\lambda = \frac{\zeta^2 + 6}{4} \quad \text{und} \quad \alpha^2 = \frac{-\zeta^2 + 12\zeta + 9}{4(\zeta^2 + 6)} \quad (3.13)$$

ergibt sich schliefllich

$$\begin{aligned} k &= \frac{8^{\frac{5}{4}}}{\sqrt{2\pi}} \left( \frac{\zeta^2 + 6}{4} \right)^{\frac{3}{4}} \left( \frac{-\zeta^2 + 12\zeta + 9}{4(\zeta^2 + 6)} \right)^{\frac{5}{4}} \\ &= \frac{2^{-\frac{3}{4}}}{\sqrt{\pi}} \frac{(-\zeta^2 + 12\zeta + 9)^{\frac{5}{4}}}{\sqrt{\zeta^2 + 6}}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Insgesamt ist dann der energetische Abstand gegeben durch

$$\Delta\varepsilon = \frac{2^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{\pi}} \frac{(-\zeta^2 + 12\zeta + 9)^{\frac{5}{4}}}{\sqrt{\zeta^2 + 6}} \cdot \exp \left( -\frac{\sqrt{2}}{12} \frac{(-\zeta^2 + 12\zeta + 9)^{\frac{3}{2}}}{\zeta^2 + 6} \right). \quad (3.15)$$

Trägt man die Energiedifferenz gegen den Parameter  $\zeta$  auf, so erhält man Abbildung 11.

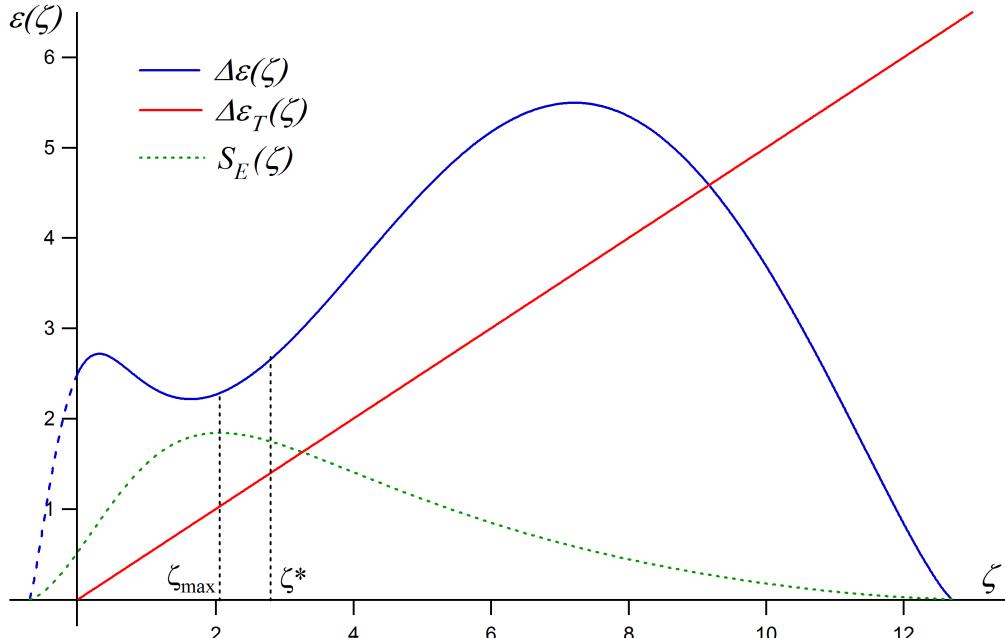


Abbildung 11:  $\Delta\varepsilon(\zeta)$ ; in Rot der exakte Zusammenhang

Der exakte Wert für den Energieabstand ist in [1] aufgeführt als

$$\Delta E_T = \frac{a}{2}, \quad (3.16)$$

(vgl. mit (1.44)) bzw. einheitenlos in der hier verwendeten Skalierung als

$$\Delta\varepsilon_T(\zeta) = \frac{1}{2}\zeta. \quad (3.17)$$

Der graphische Vergleich beider Ergebnisse in Abbildung 11 zeigt, dass sich zumindest in einem gewissen Bereich von  $\zeta$  (etwa für  $2 \leq \zeta \leq 6$ ) der Verlauf von roter und blauer Kurve halbwegs ähnlich ist.

Die durchgehend gestrichelte Kurve repräsentiert die euklidische Wirkung

$$S_E(\zeta) = \frac{\sqrt{2}}{12} \frac{(-\zeta^2 + 12\zeta + 9)^{\frac{3}{2}}}{\zeta^2 + 6}, \quad (3.18)$$

die mit umgekehrten Vorzeichen im Exponenten von  $\Delta\varepsilon$  (3.15) steht. Je größer sie ist, desto besser sollte, wie bereits beschrieben, die Approximation sein. Das Wirkungsmaximum liegt bei

$$\zeta_{\max} = (6\sqrt{201} + 82)^{\frac{1}{3}} - (6\sqrt{201} - 82)^{\frac{1}{3}} - 2 \approx 2,055, \quad (3.19)$$

in der Abbildung entspricht das der linken gestrichelten Hilfslinie. Offensichtlich stimmt die Entwicklung der Kurven an dieser Stelle relativ gut überein. Die Näherungskurve  $\Delta\varepsilon$  hat dort eine Steigung von etwa 0,3, dem steht eine ähnliche Steigung von 0,5 der exakten Geraden gegenüber. Vergleicht man die beiden Energieaufspaltungen

$$\Delta\varepsilon(\zeta_{\max}) \approx 2,282 \quad (3.20)$$

und

$$\Delta\varepsilon_T(\zeta_{\max}) \approx 1,028, \quad (3.21)$$

so ergibt sich

$$\Delta\varepsilon(\zeta_{\max}) \approx 2,221 \cdot \Delta\varepsilon_T(\zeta_{\max}), \quad (3.22)$$

d. h. die Näherung liefert gut den doppelten Wert.

Die rechte gestrichelte Hilfslinie in Abbildung 11 markiert einen weiteren interessanten Punkt, dort ist nämlich  $\zeta^* \approx 2,795$ , für das das verwendete Näherungspotenzial dem „Original“ besonders ähnlich ist. Hier hofft man also, einen sehr authentischen Wert dieser semiklassischen Näherung zu bekommen, den man dann entsprechend gut dem exakten Resultat für das exakte Potenzial gegenüberstellen kann. Die Steigung der semiklassischen Kurve ist hier etwa 0,66 und damit leicht größer als die Steigung 0,5 der exakten Kurve  $\Delta\varepsilon_T$ . Die numerische Auswertung ergibt

$$\Delta\varepsilon(\zeta^*) \approx 2,655 \quad (3.23)$$

und

$$\Delta\varepsilon_T(\zeta^*) \approx 1,397, \quad (3.24)$$

### 3 Die Energien des ersten angeregten Zustands

---

was schließlich

$$\Delta\varepsilon(\zeta^*) \approx 1,900 \cdot \Delta\varepsilon_T(\zeta^*) \quad (3.25)$$

bedeutet.

Man beobachtet, dass bei  $\zeta_{\max}$  und  $\zeta^*$  die Kurven fast den gleichen Abstand haben, auch ist ihr Verlauf zwischen den Punkten vergleichbar. Tatsächlich handelt es sich um den Bereich von  $\zeta$ , in dem sich die beiden Funktionen mit am ähnlichsten verhalten.

## 4 Auf dem Weg zum Vorfaktor K: Die Kinklösung

Wie bereits in der Einleitung dargelegt, spielt die sog. Kinklösung als klassische Pfadlösung, die die euklidische Wirkung minimiert, eine zentrale Rolle für die Bestimmung des Vorfaktors  $K$ , der bei der Berechnung des energetischen Abstands zwischen Grund- und erstem Anregungszustand auftritt. Aus der Kinklösung bildet man den Operator  $A$ , dessen Eigenwerte schließlich auf den gesuchten Faktor führen. Zwar wird dieser selbst in dieser Arbeit nicht ermittelt, doch soll jene Lösung der klassischen euklidischen Bewegungsgleichung noch berechnet werden.

Aus dem euklidischen Energieerhaltungssatz in (1.59) erhält man durch Trennung der Variablen die Lösung

$$\tau - \tau_0 = \int_0^{x_c} \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m} V(x)}} \quad (4.1)$$

für die euklidische Zeit  $\tau$ , deren Umkehrung dann die gesuchte Kinklösung ist. Diese wird nun für die beiden in Abschnitt 3 näher behandelten Potenziale bestimmt.

### 4.1 Kinklösung für Beispiel 1

Mit dem Potenzial aus (2.13) und  $m = 1$  folgt die Rechnung im einheitenlosen System:

$$\begin{aligned} \tilde{\tau} - \tilde{\tau}_0 &= \int_0^{z_c} \frac{dz}{1 - \eta \cosh(z)} = \int_0^{z_c} \frac{dz}{1 - \frac{\eta}{2} e^z - \frac{\eta}{2} e^{-z}} \stackrel{y=e^z}{=} \frac{-2}{\eta} \int_1^{e^{z_c}} \frac{dy}{y^2 - \frac{2}{\eta} y + 1} \\ &= \frac{-2}{\eta} \int_1^{e^{z_c}} \frac{dy}{\left(y - \frac{1}{\eta}\right)^2 - \frac{1-\eta^2}{\eta^2}} \stackrel{s=y-\frac{1}{\eta}}{=} \frac{2}{\eta} \int_{1-\frac{1}{\eta}}^{e^{z_c}-\frac{1}{\eta}} \frac{ds}{\frac{1-\eta^2}{\eta^2} - s^2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{1-\eta^2}} \left[ \ln \left( \frac{\sqrt{1-\eta^2} + \eta s}{\sqrt{1-\eta^2} - \eta s} \right) \right]_{1-\frac{1}{\eta}}^{e^{z_c}-\frac{1}{\eta}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{1-\eta^2}} \ln \left( \frac{(\eta e^{z_c} + \sqrt{1-\eta^2} - 1)(\eta - \sqrt{1-\eta^2} - 1)}{(\eta e^{z_c} - \sqrt{1-\eta^2} - 1)(\eta + \sqrt{1-\eta^2} - 1)} \right). \end{aligned} \quad (4.2)$$

Der Übersicht halber definiert man

$$\gamma \equiv \frac{\eta + \sqrt{1-\eta^2} - 1}{\eta - \sqrt{1-\eta^2} - 1} \quad \text{und} \quad \delta \equiv \sqrt{1-\eta^2}. \quad (4.3)$$

Bilden der Umkehrfunktion liefert

$$\begin{aligned} \gamma e^{\delta(\tilde{\tau}-\tilde{\tau}_0)} &= \frac{\eta e^{z_c} + \delta - 1}{\eta e^{z_c} - \delta - 1} \\ \iff \eta e^{z_c} (\gamma e^{\delta(\tilde{\tau}-\tilde{\tau}_0)} - 1) &= (1 + \delta) \gamma e^{\delta(\tilde{\tau}-\tilde{\tau}_0)} - (1 - \delta) \\ \iff z_c(\tilde{\tau}) &= \ln \left( \frac{(1 + \delta) \gamma e^{\delta(\tilde{\tau}-\tilde{\tau}_0)} - (1 - \delta)}{\eta (\gamma e^{\delta(\tilde{\tau}-\tilde{\tau}_0)} - 1)} \right). \end{aligned} \quad (4.4)$$

## 4 Auf dem Weg zum Vorfaktor K: Die Kinklösung

---

Durch Resubstitution von  $\gamma$  und  $\delta$  erhält man

$$z_c(\tilde{\tau}) = \ln \left( \frac{e^{\sqrt{1-\eta^2}(\tilde{\tau}-\tilde{\tau}_0)}(\sqrt{1-\eta^2}-\eta+1) + \sqrt{1-\eta^2}+\eta-1}{e^{\sqrt{1-\eta^2}(\tilde{\tau}-\tilde{\tau}_0)}(\sqrt{1-\eta^2}+\eta-1) + \sqrt{1-\eta^2}-\eta+1} \right). \quad (4.5)$$

Es sei bemerkt, dass es sich bei  $\tilde{\tau}$  und  $\tilde{\tau}_0$  ebenfalls um einheitenlose Größen handelt. Für eine Rücktransformation zu regulären Zeiteinheiten müssen wieder die Skalierungsfaktoren aus (2.41) verwendet werden.

Als nächstes soll das Verhalten dieser Lösung für  $\tilde{\tau} \rightarrow \pm\infty$  untersucht werden:

$$\begin{aligned} \lim_{\tilde{\tau} \rightarrow \infty} z_c(\tilde{\tau}) &= - \lim_{\tilde{\tau} \rightarrow -\infty} z_c(\tilde{\tau}) = \ln \left( \frac{\sqrt{1-\eta^2}-\eta+1}{\sqrt{1-\eta^2}+\eta-1} \right) \\ &= \ln \left( \frac{(\sqrt{1-\eta^2}-\eta+1)(\sqrt{1-\eta^2}+\eta-1)}{(\sqrt{1-\eta^2}+\eta-1)^2} \right) \\ &= \ln \left( \frac{1}{\eta} + \sqrt{\frac{1}{\eta^2} - 1} \right) = \operatorname{arcosh} \left( \frac{1}{\eta} \right) = z_M. \end{aligned} \quad (4.6)$$

(4.5) genügt also den in Abschnitt 1.4 geforderten Randbedingungen. In Abbildung 12 ist die Kinklösung  $z_c$  für bestimmte Wahlen von  $\eta$  dargestellt. Der Nulldurchgang im tiefsten Punkt der Potenzialmulde ist bei  $\tilde{\tau}_0$ , was an der Wahl der unteren Integrationsgrenze zu Beginn von (4.2) liegt.

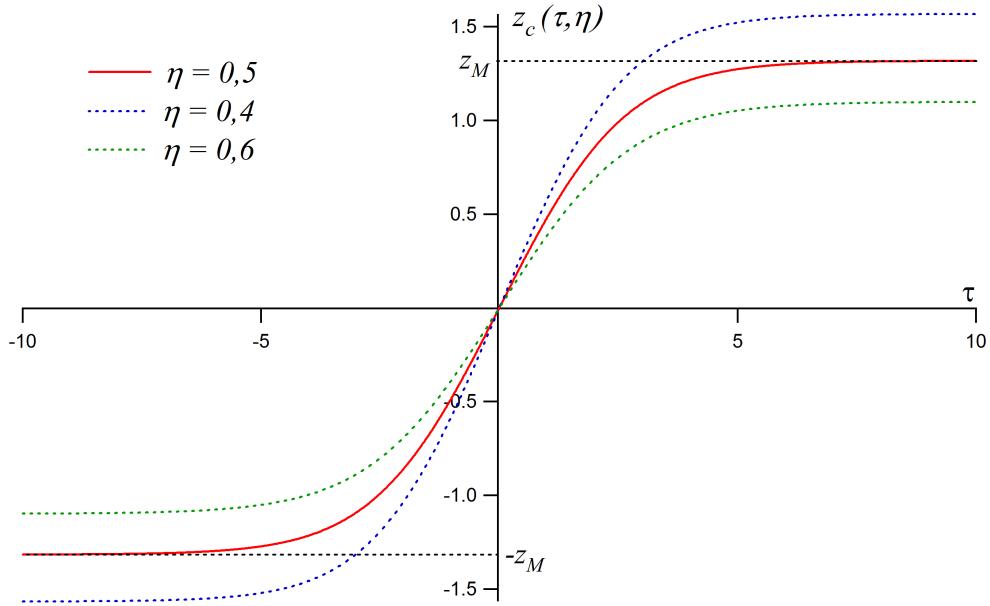


Abbildung 12: Graphische Darstellung der Kinklösung für verschiedene  $\eta$ ; je kleiner  $\eta$  wird, desto tiefer und weiter wird die Mulde des umgekehrten Potenzials, entsprechend wird die Dynamik bei  $\tilde{\tau}_0$  steiler.

## 4.2 Kinklösung für Beispiel 3

Auch für (2.58) wird die Kinklösung ermittelt, dazu soll das Potenzial in der Form

$$\tilde{v}(y) = \lambda(\alpha^2 - y^2)^2 \quad (4.7)$$

verwendet werden. Es ergibt sich in dimensionslosen Größen wegen  $|\alpha| > |y|$  auf dem betrachteten Intervall zwischen den Mulden:

$$\tilde{\tau} - \tilde{\tau}_0 = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \int_0^{y_c} \frac{dy}{\alpha^2 - y^2} = \frac{1}{\sqrt{8\lambda}\alpha} \left[ \ln \left( \frac{\alpha + y}{\alpha - y} \right) \right]_0^{y_c} = \frac{1}{\sqrt{8\lambda}\alpha} \ln \left( \frac{\alpha + y_c}{\alpha - y_c} \right). \quad (4.8)$$

Im Folgenden wird wieder die entsprechende Umkehrfunktion gesucht:

$$\begin{aligned} e^{\sqrt{8\lambda}\alpha(\tilde{\tau} - \tilde{\tau}_0)} &= \frac{\alpha + y_c}{\alpha - y_c} \\ \iff y_c(e^{\sqrt{8\lambda}\alpha(\tilde{\tau} - \tilde{\tau}_0)} + 1) &= \alpha(e^{\sqrt{8\lambda}\alpha(\tilde{\tau} - \tilde{\tau}_0)} - 1) \\ \iff y_c(\tilde{\tau}) &= \alpha \frac{e^{\sqrt{8\lambda}\alpha(\tilde{\tau} - \tilde{\tau}_0)} - 1}{e^{\sqrt{8\lambda}\alpha(\tilde{\tau} - \tilde{\tau}_0)} + 1} = \alpha \tanh[\sqrt{2\lambda}\alpha(\tilde{\tau} - \tilde{\tau}_0)]. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Durch Resubstitution von  $\alpha$  und  $\lambda$  erhält die Lösung dann ihre endgültige Form

$$y_c(\tilde{\tau}) = \sqrt{\frac{-\zeta^2 + 12\zeta + 9}{4(\zeta^2 + 6)}} \tanh \left[ \frac{\sqrt{-\zeta^2 + 12\zeta + 9}}{2\sqrt{2}} (\tilde{\tau} - \tilde{\tau}_0) \right]. \quad (4.10)$$

Im Limes  $\tilde{\tau} \rightarrow \pm\infty$  nimmt sie, wie gewünscht, die Werte  $\pm y_M$  an:

$$\lim_{\tilde{\tau} \rightarrow \infty} \alpha \cdot \frac{e^{2\alpha\beta(\tilde{\tau} - \tilde{\tau}_0)} - 1}{e^{2\alpha\beta(\tilde{\tau} - \tilde{\tau}_0)} + 1} = - \lim_{\tilde{\tau} \rightarrow -\infty} \alpha \cdot \frac{e^{2\alpha\beta(\tilde{\tau} - \tilde{\tau}_0)} - 1}{e^{2\alpha\beta(\tilde{\tau} - \tilde{\tau}_0)} + 1} = \alpha = y_M. \quad (4.11)$$

In Abbildung 13 ist wieder für verschiedene  $\zeta$  die Kinklösung dargestellt. Sie hat die gleiche Form wie in Beispiel 1, auch liegt der Nulldurchlauf bei  $\tilde{\tau}_0 = 0$ . Für größere  $0 \leq \zeta \leq 6 + \sqrt{45}$  rücken die Potenzialmulden enger zusammen, die Barriere verflacht. Entsprechend verflacht auch die Dynamik im umgekehrten Potenzial bei  $\tilde{\tau}_0$ .

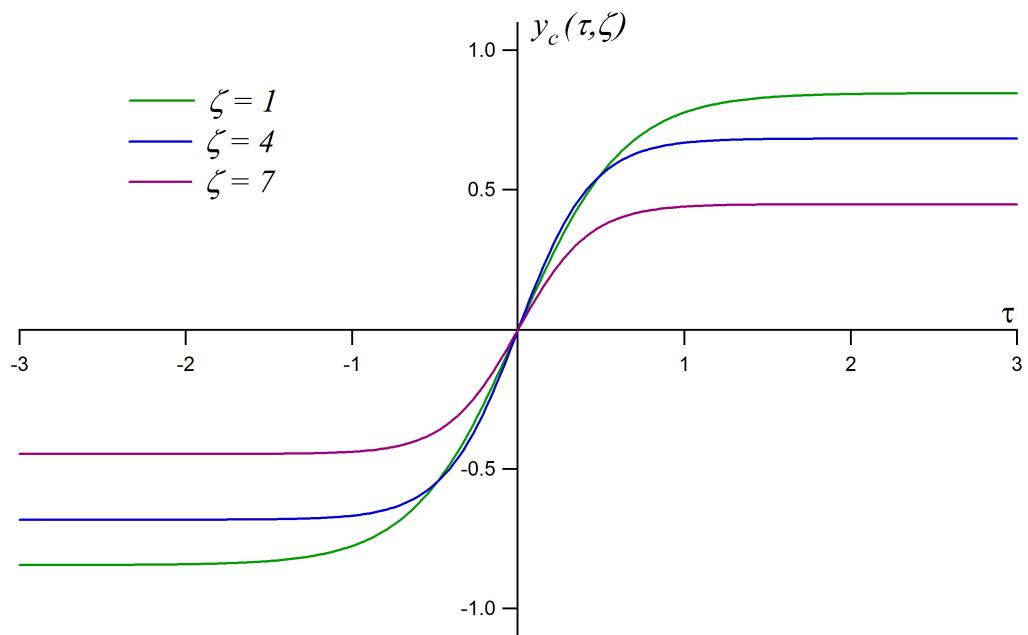


Abbildung 13: Graphische Darstellung der Kinklösung für verschiedene  $\zeta$ .

---

## 5 Zusammenfassung

Nur für das erste, in Abschnitt 2.1.1 vorgestellte Potenzial konnten die Muldenorte des exakten Potenzials und gleichzeitig ein brauchbarer Ausdruck für das auf Nullenergie verschobene Potenzial gefunden werden. Eine gewisse Ähnlichkeit zum schon länger bekannten Razavy-Potenzial motivierte einen Vergleich beider Potenziale und lieferte das Ergebnis, dass Tkachuks Beispiel ein Spezialfall des Razavy-Potenzials (für  $n = 1$ ) ist. Übereinstimmung zeigte sich dabei erwartungsgemäß auch in der Energieaufspaltung der beiden untersten Eigenzustände. Das verschobene Potenzial seinerseits wurde dann gemäß der Gleichung für die semiklassische Approximation der Energieaufspaltung, (1.61), integriert, wodurch der besagte Näherungsausdruck mit (3.4) bis auf einen Vorfaktor  $K$  angegeben werden konnte. Der Vergleich mit dem exakten Aufspaltungswert in Abhängigkeit des einzigen Parameters  $\eta$  zeigte ein in Größenordnung und durchschnittlicher Steigung vergleichbares Verhalten (s. Abb. 10). Tatsächlich wird aber  $k$  selbst noch einmal von  $\eta$  abhängen, so dass der angestellte Vergleich nur begrenzt aussagekräftig ist. Für  $\eta \rightarrow 0$ , wenn der Wert der Näherungsformel besonders genau sein sollte, ist  $k \propto \frac{1}{\eta}$  zu erwarten, eine exakte Bestimmung des Faktors könnte das Ziel weiterführender Berechnungen außerhalb dieser oder das Thema einer anderen Arbeit sein und würde sicherlich zu weiteren interessanten Ergebnissen führen. Die am Ende ermittelte Kinklösung (4.5) in diesem Potenzial hat, obwohl von der Gleichung her verschieden, Ähnlichkeit mit einem Tangens hyperbolicus und damit die angesichts der Potenzialformung erwartete Gestalt.

Eine Verallgemeinerung des vorangegangen Beispiels wurde mit Beispiel 2 behandelt. Die entsprechend kompliziertere Form des Potenzials war letztlich Hinderungsgrund für den Gebrauch zum Test der Energieapproximation, insbesondere die Integration des verschobenen Potenzials schien nicht ohne weiteres möglich zu sein. Besonderheit dieses Beispiels war die endlich hohe äußere Begrenzung des Potenzials, die höher und tiefer als die mittige Barriere liegen kann. Die entsprechende Bedingung wurde zu (2.39) ermittelt.

Das dritte Beispiel wurde nur näherungsweise behandelt, da die genaue Position der Mulden nicht analytisch bestimmt und damit das Potenzial nicht, wie erforderlich, mit den Mulden auf Nullniveau gelegt werden konnte. Nach der Reduktion der Parameter auf  $\zeta$  und einer Umskalierung war dies zwar für festgelegte  $\zeta$  möglich, jedoch der resultierende Ausdruck zur Integration im Sinne von (1.61) nicht geeignet. Hilfsweise wurde mit der Reihenentwicklung des Potenzials bis vierter Ordnung die Analyse fortgesetzt. Ein Parameterwert  $\zeta^*$ , bei dem diese Näherung recht genau ist, konnte mithilfe der Differenzenfunktion von exaktem und genähertem Potenzial gefunden werden. Das genäherte und verschobene Potenzial ließ sich dann problemlos im Rahmen der Berechnung von (1.61) integrieren. Ein weiterer Vorteil der Potenzialnäherung war, dass in Analogie zu einem Beispiel in [2] der im ersten Fall unbestimmt gebliebene Vorfaktor  $K$  identifiziert werden konnte. So ergab sich mit (3.15) ein vollständig bestimmter und zum Vergleich (s. Abb. 11) tauglicher Ausdruck, der allerdings nur näherungsweise das richtige Potenzial repräsentiert. Gesondert wurden zwei Werte von  $\zeta$  betrachtet, zum einen  $\zeta_{\max}$ , für das die semiklassische Approximation am genauesten sein soll, zum anderen  $\zeta^*$ , für das ja das ver-

## 5 Zusammenfassung

---

wendete Näherungspotenzial dem eigentlichen sehr nahe kommt. An diesen Punkten sind die approximierten Werte jeweils etwa das Doppelte der exakten; der Verlauf der Kurven zwischen den Punkten ist ähnlich, ihr Abstand etwa konstant. Für andere Werte von  $\zeta$  stimmen genähertes und vollständiges Potenzial nicht unbedingt gut überein. Das zum Teil sehr unterschiedliche Verhalten der Graphen in Abbildung 11 lässt daher nicht zwingend auf mangelnde Genauigkeit der halbklassischen Energieaufspaltungsformel schließen. Zuletzt wurde auch hier die Kinklösung bestimmt, die in Analogie zu dem Beispiel in [2] durch einen Tangens hyperbolicus gegeben ist.

Ein vierter Beispiel wurde zwar untersucht, da es aber unter keinen Umständen ein Doppelmuldenpotenzial darstellt, fand es für die weitere Analyse keine Berücksichtigung mehr.

## Literatur

- [1] V. M. Tkachuk: *Quasi-exactly solvable potentials with two known eigenstates*, Physics Letters A 245 (1998), 177-182
- [2] G. Münster: *Quantentheorie*, 2. Auflage, De Gruyter Berlin/New York, 2010
- [3] G. Schwabl: *Quantenmechanik* (QM I), 7. Auflage, Springer Berlin/Heidelberg/New York, 2007
- [4] M. Razavy: *An exactly solvable Schrödinger equation with a bistable potential*, Am. J. Phys. 48 (1980), 285-288

Folgende Programme wurden für Rechnungen und zum Erstellen der Graphiken verwendet:

- Wolfram: *Mathematica*, Vers. 6.0.0
- Texas Instruments: *Derive*, Vers. 6.00
- WaveMetrics, Inc: *Igor Pro*, Vers. 5.0.1.0

## **Literatur**

---

Hiermit versichere ich, die Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die aufgeführten Hilfsmittel verwendet zu haben.

Münster, den 26.01.2011