

# Energieaufspaltung im Razavy-Potenzial

Energy splitting in the Razavy potential

**Bachelorarbeit**  
im Rahmen des Studiengangs  
Physik (Bachelor of Science)

Vorgelegt von  
**Winnie Clara Poel**

Ausgegeben und betreut von  
**Prof. Dr. Gernot Münster**  
Institut für Theoretische Physik

Münster, 25. Oktober 2011

Diese Fassung der Arbeit unterscheidet sich nur geringfügig von der am 25. Oktober 2011 dem Prüfungsamt vorgelegten Version.

---

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>3</b>
2.1	Einheitensystem . . . . .	3
2.2	Energieaufspaltung in Doppelmulden-Potenzialen . . . . .	3
2.3	Die Energieaufspaltung in semiklassischer Näherung . . . . .	6
2.4	Ziel dieser Arbeit . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Das Razavy-Potenzial</b>	<b>9</b>
3.1	Umskalierung . . . . .	9
3.2	Untersuchung der Eigenschaften von $v(x)$ . . . . .	9
3.3	Höhenverschiebung . . . . .	11
<b>4</b>	<b>Semiklassische Rechnungen</b>	<b>13</b>
4.1	Berechnung des führenden Terms . . . . .	13
4.2	Der Grenzfall $s \rightarrow 0$ . . . . .	14
4.3	Die Kink-Lösung . . . . .	15
4.3.1	Berechnung der Kink-Lösung . . . . .	15
4.3.2	Überprüfung der Randbedingungen . . . . .	17
<b>5</b>	<b>Quantenmechanische Rechnungen</b>	<b>19</b>
5.1	Die Schrödingergleichung . . . . .	19
5.2	Asymptotische Lösung . . . . .	19
5.3	Reihenansatz für $\phi(x)$ . . . . .	20
5.4	Rekursionsrelationen . . . . .	21
5.5	Eigenenergien $\epsilon_i$ für $n = 1$ bis $n = 5$ . . . . .	22
<b>6</b>	<b>Vergleich der Ergebnisse</b>	<b>27</b>
6.1	Abschätzung der Korrektur $\kappa(s)$ . . . . .	27
6.2	Der Grenzfall $s \rightarrow 0$ . . . . .	32
6.3	Der Grenzfall $s \rightarrow 1$ . . . . .	33
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>35</b>



---

# 1 Einleitung

Quantenmechanische Doppelmulden-Potenziale finden häufig als einfache Modelle zur Beschreibung von Molekülen Anwendung, da sich mit ihrer Hilfe das Verhalten eines Teilchens im Kraftfeld anderer Teilchen beschreiben lässt. Soll dabei ein bestimmtes Molekül möglichst genau genähert werden, so führt dies schnell auf Potenziale, deren Lösungen nicht mehr analytisch gefunden werden können. In einigen Fällen, wie z.B. beim Ammoniak-Maser in [1] und [2], ist man jedoch nur an der Energieaufspaltung zwischen den beiden niedrigsten Energie-Eigenwerten interessiert, welche in Beziehung zum Tunneleffekt für den Potenzialberg zwischen den Mulden steht. Hierfür kann eine semiklassische Näherungsformel gefunden werden, welche sich unter Hinzuziehen des quantenmechanischen Pfadintegrals begründen lässt [3].

Das im Rahmen dieser Arbeit genauer untersuchte Razavy-Potenzial [4] stellt eines der wenigen Doppelmulden-Potenziale dar, für welche sich die oben genannte Energieaufspaltung analytisch berechnen lässt und damit exakt bekannt ist. Es eignet sich daher ausgezeichnet, um die Qualität der Näherungsformel zu prüfen.

Diese Arbeit untersucht nach einer kurzen Darstellung der Grundlagen zunächst das Razavy-Potenzial auf seine Eigenschaften und vereinfacht den Ausdruck für das Potenzial durch Umskalierungen und Höhenverschiebung.

Anschließend wird die semiklassische Näherungsformel verwendet, um die Energiedifferenz zwischen den beiden niedrigsten Energie-Eigenwerten des Razavy-Potenzials zu bestimmen. Hierbei lässt sich der so erhaltene Ausdruck in einen führenden Term und eine Korrektur unterteilen. Für die Berechnung dieser Korrektur ist die sogenannte Kink-Lösung von großer Bedeutung. Zwar ist die vollständige Bestimmung des Korrekturterms zu aufwendig, um sie in dieser Arbeit durchzuführen, die Kink-Lösung wird jedoch angegeben.

Die anschließende quantenmechanische Berechnung der Energieaufspaltung orientiert sich wesentlich an [4]. Ein darauf folgender Vergleich der Ergebnisse aus semiklassischer und quantenmechanischer Rechnung ermöglicht es, die ungefähre Gestalt des bisher unbekannten Korrekturterms zu untersuchen und die Ergebnisse der semiklassischen Rechnung zu prüfen.



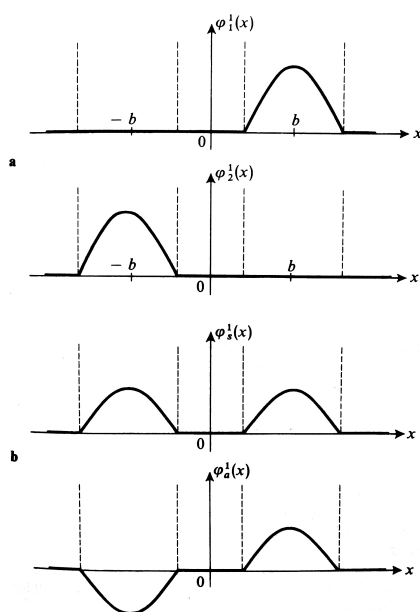
## 2 Grundlagen

### 2.1 Einheitensystem

Alle in dieser Arbeit durchgeführten Rechnungen verwenden eine Wahl der Einheiten, sodass  $\hbar \equiv 1$  gilt.

### 2.2 Energieaufspaltung in Doppelmulden-Potenzialen

Die Energieaufspaltung  $\Delta E$  zwischen den beiden niedrigsten Energie-Eigenzuständen eines Systems, das sich in einem Doppelmulden-Potenzial bewegt, ist eng verbunden mit der Tunnelwahrscheinlichkeit für den Potenzialberg zwischen den beiden Einzelmulden.



**Abb. 2.1:** a) Die Wellenfunktionen des Grundzustandes beschreiben stationäre Zustände der selben Energie, einmal im rechten und einmal im linken Rechteckspotenzial lokalisiert.

b) Der symmetrische (oben) und antisymmetrische (unten) Zustand des Gesamtsystems aus zwei Potenzialen.<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Die Abbildung ist [1] entnommen, S.437.

Betrachtet man wie in [1] zwei durch einen unendlich hohen Potenzialwall getrennte identische Einzelmulden-Potenziale, so ist das niedrigste Eigenniveau zweifach entartet. Die beiden zugehörigen Eigenfunktionen werden durch eine symmetrische bzw. antisymmetrische Linearkombination der Grundzustands-Wellenfunktion des Einzelmulden-Potenzials gebildet und besitzen die selbe Eigenenergie.

Abbildung 2.1 zeigt diese Wellenfunktionen am Beispiel zweier Rechteck-Potenziale der Breite  $a$ , die sich jeweils symmetrisch um den Wert  $x = \pm b$  befinden und in [1] betrachtet werden.

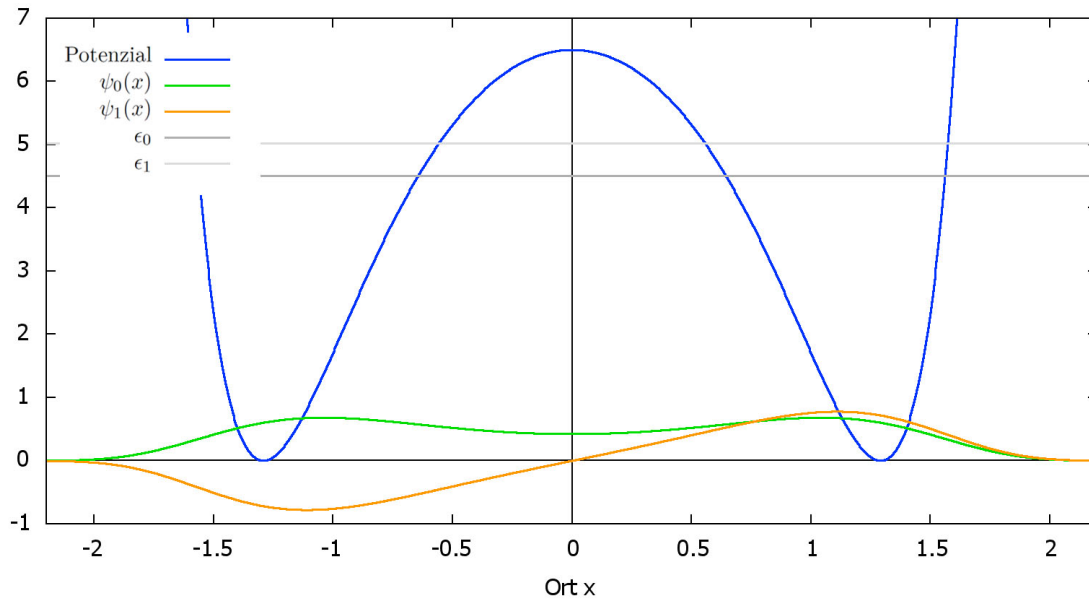
Sobald der Potenzialwall nun aber eine endliche Höhe besitzt, muss die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Bereich des Walls nicht mehr notwendigerweise verschwinden. Das System kann von der einen in die andere Mulde des Potenzials tunneln und die Entartung des Grundzustandes ist aufgehoben. Die Energie des antisymmetrischen Zustandes ist hierbei höher als die des symmetrischen.

Die Beschreibung des Ammoniak-Moleküls ( $\text{NH}_3$ ) beispielsweise kann nach [1] und [2] mit Hilfe eines solchen Doppelmulden-Potenzials geschehen. Das Molekül besitzt den Aufbau einer Pyramide. Die Wasserstoffatome bilden ein (in diesem Modell als starr angesehenes) gleichseitiges Dreieck als Grundfläche, über der sich das Stickstoffatom im Abstand  $x$  (senkrecht zur  $\text{H}_3$ -Ebene gemessen) befindet.

Das Potenzial wird als Funktion dieses Abstandes  $x$  zwischen dem N-Atom und der Ebene der H-Atome beschrieben. Für  $x = 0$  ist die Abstoßung zwischen den Atomen maximal und für große  $x$  wirkt die chemische Bindung einer weiteren Entfernung der Atome voneinander entgegen. Es gibt genau einen Abstand  $a$ , in dem die chemische Bindung und die Abstoßung zwischen den Atomen sich kompensieren. Das Potenzial weist somit zwei Minima auf, nämlich bei  $x = \pm a$ , d.h. zwei Abstände des N-Atoms, die (klassisch) stabil sind und zwischen denen das Molekül durch den Tunneffekt wechseln kann. Es tunnelt also von einem Zustand, in dem sich das N-Atom oberhalb der Grundfläche aus H-Atomen befindet, in einen Zustand, in dem die Position des N-Atoms unterhalb dieser Fläche liegt.

Die zwischen diesen Zuständen liegende Energiedifferenz  $\Delta E$  entspricht einer Frequenz von  $\omega = \Delta E/\hbar$ , die im Bereich der Mikrowellen liegt und bietet die Grundlage für den Ammoniak-Maser [2]. Eine genauere Betrachtung der Energieaufspaltung in Doppelmulden-Potenzialen ist also durchaus durch praktische Anwendungen motiviert.

Abbildung 2.2 zeigt als Beispiel eines Doppelmulden-Potenzials das im Abschnitt 3 und [4] ausführlich behandelte Razavy-Potenzial für  $s = 0, 15$  und  $n = 2$ . Wie oben beschrieben ist die Wellenfunktion des Grundzustandes  $|\psi_0\rangle$  symmetrisch und die des ersten angeregten Zustandes  $|\psi_1\rangle$  antisymmetrisch.<sup>1</sup>



**Abb. 2.2:** Beispiel eines Doppelmulden-Potenzials: das Razavy-Potenzial (3.19) für  $s = 0, 15$  und  $n = 2$ . Eingezeichnet sind die Eigenenergien  $\epsilon_0$  und  $\epsilon_1$  der beiden niedrigsten Zustände  $|\psi_0\rangle$  und  $|\psi_1\rangle$ , sowie die normierten zugehörigen Wellenfunktionen  $\psi_0(x)$  und  $\psi_1(x)$ .

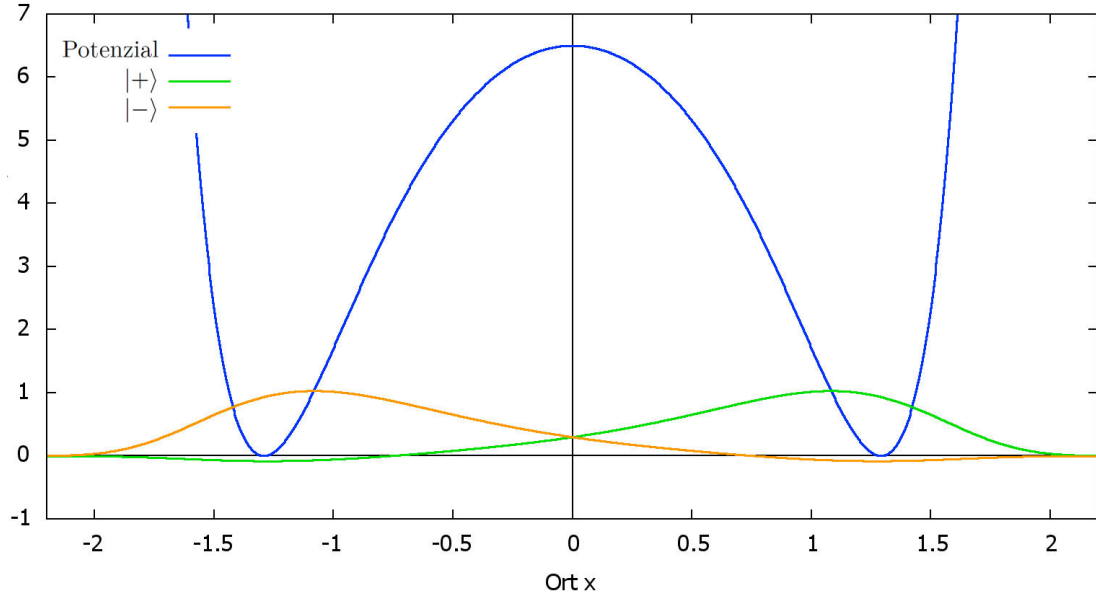
Aus diesen Zuständen lassen sich Mischzustände konstruieren, die jeweils hauptsächlich in einer der Einzelmulden lokalisiert sind. Sie lauten

$$\begin{aligned} |+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_0\rangle + |\psi_1\rangle) , \\ |-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_0\rangle - |\psi_1\rangle) . \end{aligned} \quad (2.1)$$

<sup>1</sup>Die Wellenfunktionen ergeben sich durch Auswerten von (5.9) für  $n = 2$  und  $s = 0, 15$ .  $\phi(x)$  ist u. A. für  $n = 2$  in [4] angegeben und berechnet sich aus (5.24) und (5.21) bzw. (5.23). Die Wellenfunktionen wurden mit Hilfe von Mathematica 8.0 (numerisch) normiert. Die Eigenenergien sind [4] oder (5.24) zu entnehmen und wurden analog zu (3.18) in der Höhe verschoben.



Abbildung 2.3 zeigt diese Mischzustände wieder am Beispiel des oben bereits erwähnten Razavy-Potenzials.



**Abb. 2.3:** Die gemischten Zustände  $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_0\rangle + |\psi_1\rangle)$  und  $|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_0\rangle - |\psi_1\rangle)$  sind jeweils hauptsächlich in einer der Mulden des Potenzials lokalisiert.

Wie oben besprochen und in Abbildung 2.2 zu sehen, besitzen der symmetrische und der antisymmetrische Zustand nicht exakt die gleiche Energie, sondern es existiert eine Energieaufspaltung<sup>2</sup>

$$\Delta E = E_1 - E_0 > 0 . \quad (2.2)$$

Diese Energieaufspaltung wird wie bereits erwähnt durch den Tunneleffekt herbeigeführt, dessen Auftreten durch das Übergangsmatrixelement  $\langle + | H | - \rangle$  charakterisiert wird. Zwischen der Energieaufspaltung und diesem Matrixelement besteht nach [3] folgender Zusammenhang

$$\Delta E = -2 \langle + | H | - \rangle . \quad (2.3)$$

Im nun folgenden Abschnitt, dem [3] zugrunde liegt, soll diese Energieaufspaltung in einer semiklassischen Näherung bestimmt werden.

<sup>2</sup>Zur Umrechnung von  $\epsilon$  in  $E$  siehe (3.4).

### 2.3 Die Energieaufspaltung in semiklassischer Näherung

Die Berechnung des Matrixelements  $\langle + | H | - \rangle$  geschieht in [3] unter Verwendung eines euklidischen Pfadintegrals. Den Ausgangspunkt bildet die Formel

$$\Delta E \approx 2 \int \mathcal{D}x \, e^{-S_E[x]} , \quad (2.4)$$

in welcher  $S_E$  die euklidische Wirkung ist

$$S_E = \int d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x(\tau)) \right\} . \quad (2.5)$$

Man erhält sie aus der klassischen Wirkung

$$S = \int_0^t dt' \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x(t')) \right\} \quad (2.6)$$

durch den Übergang zu imaginären Zeiten  $t = -i\tau$ . Der Imaginärteil  $\tau$  wird hierbei als euklidische Zeit bezeichnet und es besteht der Zusammenhang

$$S_E = -iS \Big|_{t=-i\tau} . \quad (2.7)$$

Das Integral in (2.4) wird über alle Pfade ausgeführt, welche die Randbedingungen

$$x\left(-\frac{T}{2}\right) = -a , \quad x\left(\frac{T}{2}\right) = a \quad (2.8)$$

erfüllen und einen Nulldurchgang besitzen, wobei am Schluss noch der Limes  $T \rightarrow \infty$  gebildet werden muss.

Die Berechnung dieses Integrals erfolgt nun unter Anwendung einer semiklassischen Näherung, durch welche man ein Gauß'sches Integral erhält, das sich im Fall des Razavy-Potenzials wie in Abschnitt 4 gezeigt berechnen lässt. Diese Näherung besteht darin, dass  $S_E$  um die klassische Lösung  $x_c(\tau)$  entwickelt wird, welche ein Minimum von  $S_E$  darstellt. Ein beliebiger Pfad wird dann ausgedrückt durch

$$x(\tau) = x_c(\tau) + y(\tau) \quad (2.9)$$

und die Näherung vernachlässigt alle Terme mit einer Ordnung höher als  $y^2$ . Für die Wirkung ergibt dies

$$S_E[x] = S_E[x_c] + \frac{1}{2} \int d\tau \, y(\tau) A y(\tau) + \mathcal{O}(y^3) , \quad (2.10)$$

worin  $A$  ein hier nicht genauer behandelter Operator ist. In einem nächsten Schritt wird das Pfadintegral durch das entsprechende Gaußintegral genähert. Dies liefert

$$\int \mathcal{D}x \, e^{-S_E} = e^{-S_E[x_c]} (\det A)^{-\frac{1}{2}} \cdot N \quad (2.11)$$

mit dem hier ebenfalls nicht genauer spezifizierten Normierungsfaktor  $N$ . Wie bereits erwähnt handelt es sich beim klassischen Pfad  $x_c(\tau)$  um ein Minimum der euklidischen Wirkung  $S_E$ , d.h. es muss gelten

$$\frac{\partial S_E}{\partial x_c(\tau)} = 0 . \quad (2.12)$$

Nach (2.5) bedeutet dies

$$m\ddot{x}_c = V'(x_c) . \quad (2.13)$$

Es handelt sich hierbei um die euklidische Bewegungsgleichung, welche zur Bewegung eines Massepunktes im Potenzial  $-V(x)$  gehört. Ihre Lösung wird „Kink-Lösung“ genannt. Sie wird für das Razavy-Potenzial in Abschnitt 4.3.1 berechnet und muss die Randbedingungen

$$x_c(-\infty) = -a \quad \text{und} \quad x_c(\infty) = a \quad (2.14)$$

erfüllen. Es handelt sich also um eine Bewegung des Massepunkts vom einen Maximum bei  $x = -a$  zum anderen Maximum bei  $x = a$  mit genau einem Durchlauf des Minimums bei  $x = 0$ . Unter Verwendung des euklidischen Energiesatzes

$$\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) = 0 \quad (2.15)$$

schreibt sich die euklidische Wirkung dieser Lösung als

$$S_E[x_c] = \int d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}^2 + V \right\} = \int d\tau m \dot{x}^2 = \int_{-a}^a dx m \dot{x} = \int_{-a}^a dx \sqrt{2mV(x)} . \quad (2.16)$$

Indem der Vorfaktor  $K = N(\det A)^{-\frac{1}{2}}$  eingeführt wird, schreibt sich (2.4) durch Ausnutzen von (2.11) und (2.16) als der schlichte Ausdruck

$$\Delta E = 2K e^{-\int_{-a}^a dx \sqrt{2mV(x)}} . \quad (2.17)$$

Der Zusammenhang zwischen Tunneleffekt und Energieaufspaltung wird hier durch das Auftreten des Gamowfaktors auf der rechten Seite aufgezeigt.

Zuletzt sein noch gesagt, dass nach [3] diese Näherung umso besser ist, desto kleiner  $\Delta E$  bzw. desto größer  $S_E[x_c]$  und dass die Berechnung des korrigierenden Vorfaktors  $K$  erheblich komplizierter als die des restlichen Terms ist und daher in dieser Arbeit nicht durchgeführt wird.

## 2.4 Ziel dieser Arbeit

Nachdem nun die semiklassische Näherungsformel vorgestellt wurde, können die Motivation und das Ziel dieser Arbeit genauer erläutert werden.

Das oben beschriebene Beispiel des Ammoniak-Masers zeigt deutlich, dass es oftmals schon von großem Vorteil sein kann, zumindest die Energieaufspaltung zwischen den zwei niedrigsten Zuständen zu kennen, auch wenn die analytischen Lösungen des Potenzials nicht gefunden werden können. Die Näherung aus (2.17) ist eine Möglichkeit hierzu, deren Eigenschaften in dieser Arbeit untersucht werden sollen. Um einen Vergleich mit exakten Ergebnissen anstellen zu können, wird das Razavy-Potenzial hinzugezogen und die Energieaufspaltung quantenmechanisch berechnet.

Da der Faktor  $K$  in dieser Arbeit nicht berechnet wird, ist ein direkter Vergleich der Ergebnisse für  $\Delta E$  nicht möglich. Es kann jedoch überprüft werden, wie groß der Einfluss des Vorfaktors  $K$  auf den grundsätzlichen Verlauf<sup>3</sup> des semiklassischen Ergebnisses für  $\Delta E$  ist, indem der Exponential-Term und die exakte quantenmechanisch berechnete Energieaufspaltung grafisch dargestellt und verglichen werden. Wenn  $K$  tatsächlich nur korrigierende Wirkung hat, sollte der grobe Verlauf der beiden Graphen übereinstimmen.

Zuletzt kann außerdem aus (2.17) durch Einsetzen der quantenmechanischen Ergebnisse für  $\Delta E$  und den berechneten Exponential-Term eine Abschätzung für den Faktor  $K$  gefunden werden. Diese Arbeit wird versuchen aus der so gewonnen Abschätzung Aussagen über die Gestalt des womöglich in einer zukünftigen Arbeit zu berechnenden Faktors  $K$  zu treffen.

<sup>3</sup>„Verlauf“ meint hier den Verlauf mit dem Parameter  $s$ , von dem das Razavy-Potenzial, wie in Kapitel 3 zu sehen, abhängt.



---

## 3 Das Razavy-Potenzial

Das in [4] vorgestellte Razavy-Potenzial ist gegeben durch

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

Es hängt von den drei Parametern  $\beta$ ,  $\xi$  und  $n$  ab, wobei  $n$  eine positive ganze Zahl ist. Die Größe  $m$  beschreibt die Masse des Teilchens, welches sich unter dem Einfluss des Potenzials  $V(x)$  befindet.

### 3.1 Umskalierung

Um im Weiteren die Rechnungen übersichtlich zu halten, werden die Eigenenergien  $E$  eines einzelnen Teilchens der Masse  $m$  im Potenzial und das Potenzial selbst wie folgt umskaliert

$$V(x) = \frac{\beta^2}{2m} v(x) , \quad (3.2)$$

$$v(x) = \frac{1}{8} \xi^2 \cosh(4\beta x) - (n+1)\xi \cosh(2\beta x) - \frac{1}{8} \xi^2 , \quad (3.3)$$

$$E = \frac{\beta^2}{2m} \epsilon . \quad (3.4)$$

Eine weitere Vereinfachung des Ausdrucks für das Potenzial  $v(x)$  lässt sich durch Einführen der dimensionslosen Größe

$$\hat{x} = \beta x \quad (3.5)$$

erreichen. Dies führt auf

$$v(\hat{x}) = \frac{1}{8} \xi^2 [\cosh(4\hat{x}) - 1] - (n+1)\xi \cosh(2\hat{x}) . \quad (3.6)$$

Im Weiteren wird wieder die Bezeichnung  $x$  verwendet, gemeint ist jedoch weiterhin  $\hat{x}$ , sofern nicht anders angegeben. In einem weiteren Schritt hin zu einer übersichtlicheren Form des Potenzials definiert man einen neuen Parameter

$$s = \frac{\xi}{2(n+1)} . \quad (3.7)$$

Es ergibt sich damit der Ausdruck

$$v(x) = \frac{1}{2} (n+1)^2 \left[ s^2 (\cosh(4x) - 1) - 4s \cosh(2x) \right] . \quad (3.8)$$

### 3.2 Untersuchung der Eigenschaften von $v(x)$

Für das in (3.8) gefundene Potenzial  $v(x)$  wird nun untersucht, in welchem Bereich des Parameters  $s$  ein Doppelmulden-Potenzial vorliegt, da nur dieser Fall hier von Interesse ist. Zur Auswertung der semiklassischen Näherungsformel und zur Berechnung der Kink-Lösung ist es

außerdem wichtig, die Lage der Minima des Potenzials zu kennen. Diese werden nun berechnet.

Damit bei  $x = \tilde{x}$  ein Minimum des Potenzials liegt, muss

$$\begin{aligned} v'(\tilde{x}) &= \frac{1}{2}(n+1)^2 \left[ 4s^2 \sinh(4\tilde{x}) - 8s \sinh(2\tilde{x}) \right] = 0 \\ &\Rightarrow s [s \sinh(4\tilde{x}) - 2 \sinh(2\tilde{x})] = 0 \end{aligned} \quad (3.9)$$

erfüllt sein. Mögliche Lösungen für  $\tilde{x}$  ergeben sich aus den Bedingungen

$$\begin{aligned} s = 0 \quad \vee \quad s \sinh(4\tilde{x}) - 2 \sinh(2\tilde{x}) &= 0 \\ \Rightarrow 2 \sinh(2\tilde{x}) (s \cosh(2\tilde{x}) - 1) &= 0 . \end{aligned} \quad (3.10)$$

Der Fall  $s = 0$ , für den das Potenzial konstant den Wert null besitzt, ist physikalisch uninteressant. Unter der Annahme  $s \neq 0$  ergeben sich aus der Gleichung auf der rechten Seite drei Lösungen. Es gilt entweder

$$2 \sinh(2\tilde{x}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\tilde{x} = 0} \quad (3.11)$$

oder

$$\begin{aligned} s \cdot \cosh(2\tilde{x}) - 1 &= 0 \\ \Rightarrow |2\tilde{x}| &= \cosh^{-1} \left( \frac{1}{s} \right) \\ \Rightarrow \boxed{\tilde{x}_{\pm} = \pm \frac{1}{2} \cosh^{-1} \left( \frac{1}{s} \right), \quad \in \mathbb{R} \quad \text{für} \quad 0 < s < 1} . \end{aligned} \quad (3.12)$$

Lokale Extrema liegen somit bei  $x = 0$  für alle  $s \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$  und bei  $x = \pm a = \pm \frac{1}{2} \cosh^{-1} \left( \frac{1}{s} \right)$  nur für alle  $s \in (0, 1)$  vor. Damit es sich bei diesen Extremalstellen um Minima handelt, muss zusätzlich  $v''(\tilde{x}) > 0$  gelten. Inwiefern die verschiedenen für  $\tilde{x}$  gefundenen Lösungen diese Forderung erfüllen, wird im Folgenden untersucht. Die zweite Ableitung des Potenzial lautet

$$v''(x) = 8(n+1)^2 [s^2 \cosh(4x) - s \cosh(2x)] . \quad (3.13)$$

Für die erste Extremalstelle bei  $\tilde{x} = 0$  ergibt sich

$$v''(x=0) = 8(n+1)^2 [s^2 - s] \begin{cases} > 0 \text{ für } s \in \mathbb{R} \setminus [0, 1] \\ < 0 \text{ für } s \in (0, 1) \end{cases} . \quad (3.14)$$

Für  $s \in (0, 1)$  handelt es sich hierbei also um ein Maximum. Die Lösung  $\tilde{x} = \pm a$  liefert

$$\begin{aligned} v''(x = \pm a) &= 8(n+1)^2 \left[ s^2 \cosh \left( 2 \cosh^{-1} \left( \frac{1}{s} \right) \right) - s \cosh \left( \cosh^{-1} \left( \frac{1}{s} \right) \right) \right] \\ &= 8(n+1)^2 \left[ s^2 \left\{ 2 \cosh^2 \left( \cosh^{-1} \left( \frac{1}{s} \right) \right) - 1 \right\} - s \left| \frac{1}{s} \right| \right] \\ &= 8(n+1)^2 \left[ s^2 \left( \frac{2}{s^2} - 1 \right) - s \left| \frac{1}{s} \right| \right] \\ &= 8(n+1)^2 (1 - s^2) > 0 \text{ für } s \in (0, 1) . \end{aligned} \quad (3.15)$$

Ein Doppelmulden-Potenzial liegt somit für  $s \in (0, 1)$  vor mit Minima bei

$$\boxed{x = \pm a = \pm \frac{1}{2} \cosh^{-1} \left( \frac{1}{s} \right)} \quad (3.16)$$

und einem Maximum bei  $x = 0$ . Außerhalb dieses Parameterbereichs verfügt das Potenzial lediglich über ein Minimum bei  $x = 0$  und keine Maxima.

### 3.3 Höhenverschiebung

Es zeigt sich, dass eine weitere Vereinfachung des Ausdrucks für  $v(x)$  möglich ist, wenn das Potenzial so in der Höhe verschoben wird, dass die Minima bei  $v(\pm a) = 0$  liegen. Es wird dazu zunächst der bisherige Wert der Minima berechnet.

$$\begin{aligned}
 v(x = \pm a) &= \frac{1}{2}(n+1)^2 \left[ s^2 \left\{ \cosh \left( 2 \cosh^{-1} \left( \frac{1}{s} \right) \right) - 1 \right\} - 4s \cosh \left( \cosh^{-1} \left( \frac{1}{s} \right) \right) \right] \\
 &= \frac{1}{2}(n+1)^2 [2(1-s^2) - 4] \\
 &= -(n+1)^2(s^2 + 1)
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

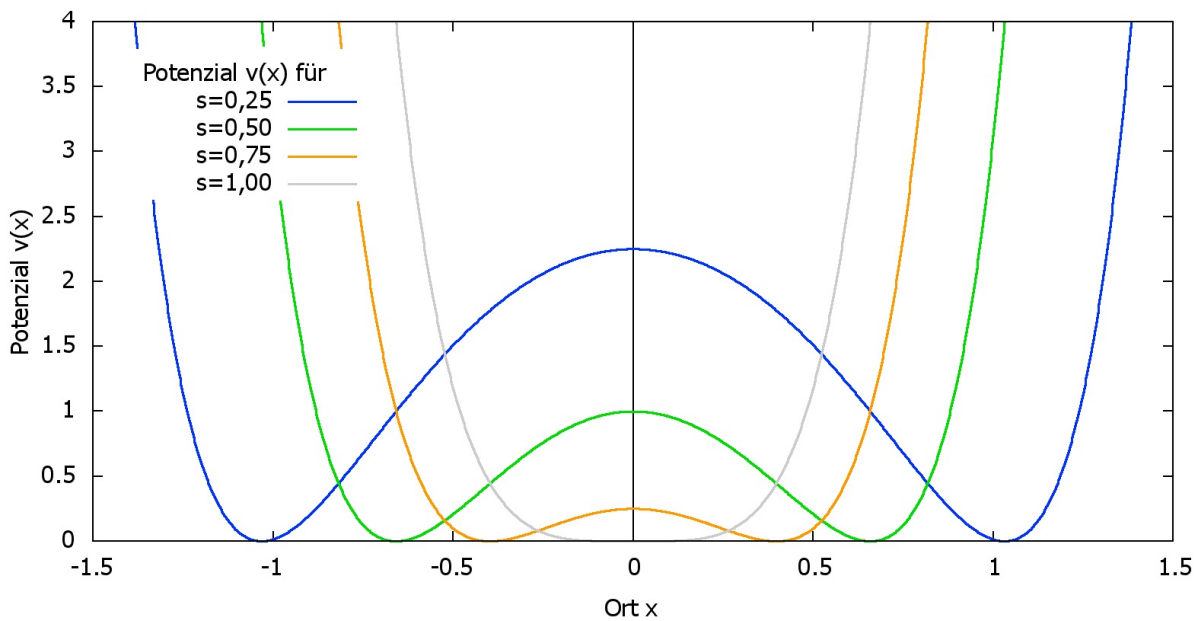
Das verschobene Potenzial ergibt sich durch Addition von  $(n+1)^2(s^2 + 1)$  zu

$$\begin{aligned}
 v(x) &= (n+1)^2 \left[ \frac{1}{2}s^2(\cosh(4x) + 1) - 2s \cosh(2x) + 1 \right] \\
 &= (n+1)^2 [s^2 \cosh^2(2x) - 2s \cdot \cosh(x) + 1] .
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

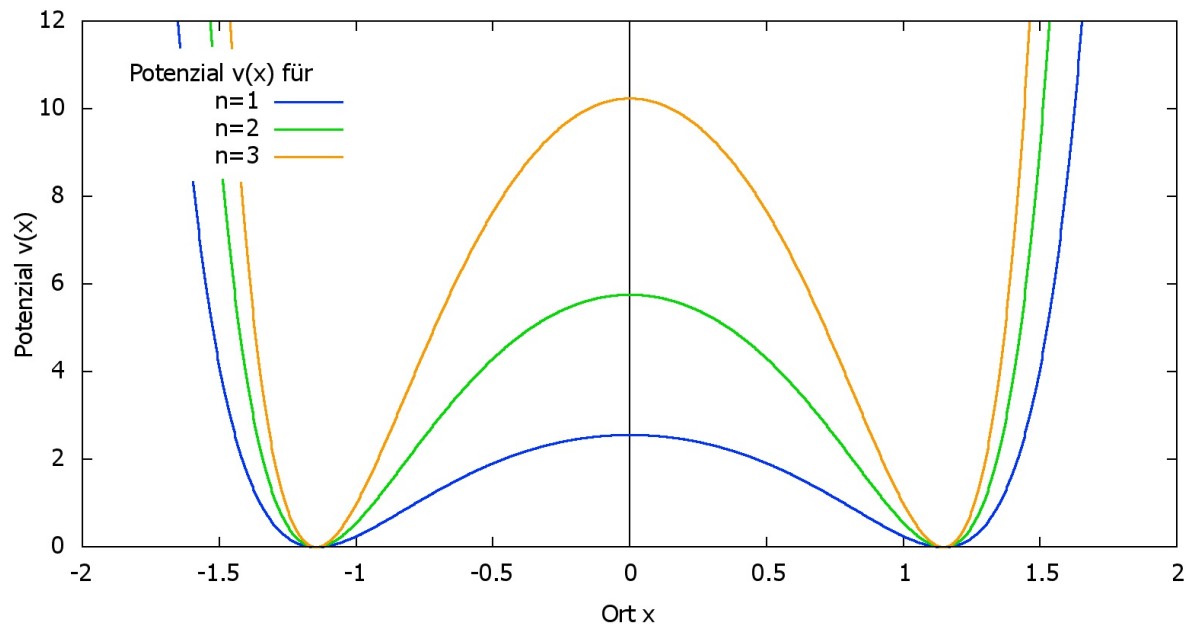
Dies lässt sich über die zweite binomische Formel zusammenfassen und man erhält

$$v(x) = (n+1)^2 [s \cosh(2x) - 1]^2 . \tag{3.19}$$

Ein Plot des nun vorliegenden Potenzials  $v(x)$  ist in Abbildung 3.1 für  $n = 1$  und verschiedene Werte des Parameters  $s$  sowie in Abbildung 3.2 für  $s = 0, 2$  und verschiedene  $n$  dargestellt.



**Abb. 3.1:** Plot des Potenzials  $v(x)$  für verschiedene Werte des Parameters  $s$  bei  $n = 1$ . Es ist sichtbar, dass bei  $s = 1$  kein Doppelmulden-Potenzial mehr vorliegt und der Potenzialberg mit kleiner werdendem  $s$  an Höhe gewinnt.



**Abb. 3.2:** Plot des Potentials  $v(x)$  für verschiedene Werte des Parameters  $n$  bei  $s = 0,2$ . Man erkennt deutlich, dass die Lage der Minima nur von  $s$  bestimmt wird und dass der Potenzialberg mit zunehmendem  $n$  in die Höhe wächst.



## 4 Semiklassische Rechnungen

Die semiklassische Näherungsformel zur Berechnung der Differenz zwischen den beiden niedrigsten diskreten Energie-Eigenwerten ist nach (2.17) gegeben durch<sup>1</sup>

$$\Delta E = 2K e^{-\int_{-b}^b dx \sqrt{2mV(x)}} , \quad (4.1)$$

wobei die Minima des Potentials bei  $x = \pm b$  liegen. Für das vorliegende Potential  $V(x)$  liegen die Nullstellen bei<sup>2</sup>

$$\hat{x} = a = \beta b \quad \Rightarrow \quad b = \frac{a}{\beta} . \quad (4.2)$$

Somit berechnet sich die Energiedifferenz  $\Delta\epsilon$  semiklassisch genähert wie folgt:

$$\begin{aligned} \Delta\epsilon &\stackrel{(3.4)}{=} \frac{2m}{\beta^2} \Delta E \\ &= \frac{2m}{\beta^2} 2K e^{-\int_{-b}^b dx \sqrt{2mV(x)}} \\ &\stackrel{(3.5)}{=} \frac{4m}{\beta^2} K e^{-\int_{-a}^a \frac{1}{\beta} d\hat{x} \sqrt{2mV(\hat{x})}} \\ &\stackrel{(3.2)}{=} \frac{4m}{\beta^2} K e^{-\int_{-a}^a \frac{1}{\beta} d\hat{x} \sqrt{2m \frac{\beta^2}{2m} v(\hat{x})}} \\ &= 2\kappa e^{-\int_{-a}^a d\hat{x} \sqrt{v(\hat{x})}} . \end{aligned} \quad (4.3)$$

In diesem Ausdruck kann der Exponential-Term als führend betrachtet werden und wird im nun folgenden Abschnitt berechnet<sup>3</sup>. Der Korrekturterm  $\kappa = \frac{2m}{\beta^2} K$  wird in Abschnitt 6 genauer untersucht.

### 4.1 Berechnung des führenden Terms

Es soll der Ausdruck

$$T(s) = e^{-\int_{-a}^a dx \sqrt{v(x)}} \quad (4.4)$$

berechnet werden. Dazu wird zunächst in einer Nebenrechnung das Vorzeichen des Ausdrucks  $s \cosh(2x) - 1$  im Intervall  $x \in (-a, a)$  untersucht

$$\begin{aligned} s \cosh(2x) - 1 &< 0 \\ \cosh(2x) &< \frac{1}{s} \\ |x| &< \frac{1}{2} \cosh^{-1} \left( \frac{1}{s} \right) = a . \end{aligned} \quad (4.5)$$

<sup>1</sup>Die Größe  $x$  meint hier bis zur erneuten Einführung von  $\hat{x}$  im Laufe von (4.3) tatsächlich  $x$ .

<sup>2</sup>In diesem Abschnitt ist mit  $V(x)$  das sich mit (3.2) aus (3.19) ergebene verschobene Potential gemeint, dessen Minima auf der  $x$ -Achse liegen.

<sup>3</sup>Im Weiteren wird erneut  $x$  geschrieben, gemeint ist jedoch wieder  $\hat{x}$  sofern nichts anderes angegeben.

Das Integral im Exponenten ergibt sich somit zu

$$\begin{aligned}
 \int_{-a}^a dx \sqrt{v(x)} &= (n+1) \int_{-a}^a dx |s \cdot \cosh(2x) - 1| \\
 &= -(n+1) \int_{-a}^a dx (s \cdot \cosh(2x) - 1) \\
 &= -(n+1) \left[ \frac{s}{2} \sinh(2x) - x \right]_{x=-a}^{x=a} \\
 &= -(n+1) \{ s \sinh(2a) - 2a \} \\
 &= -(n+1) \left\{ s \sinh \left( \cosh^{-1} \left( \frac{1}{s} \right) \right) - \cosh^{-1} \left( \frac{1}{s} \right) \right\} \\
 &= -(n+1) \left\{ s \sqrt{s^{-2} - 1} - \cosh^{-1} \left( \frac{1}{s} \right) \right\} \\
 &= (n+1) \left\{ \cosh^{-1} \left( \frac{1}{s} \right) - \sqrt{1 - s^2} \right\} .
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

Der führende Term  $T(s)$  der semiklassischen Näherung

$$\Delta\epsilon = 2\kappa(s)T(s) \tag{4.7}$$

ist damit in diesem Fall durch

$$T(s) = e^{-(n+1)(\cosh^{-1}(\frac{1}{s}) - \sqrt{1-s^2})} \tag{4.8}$$

gegeben. Für spätere Untersuchungen des Faktors  $\kappa(s)$  ist es hilfreich, den führenden Term im Grenzfall kleiner  $s$  zu kennen. Der nächste Abschnitt widmet sich daher der Untersuchung von  $T(s)$  für  $s \rightarrow 0$ .

## 4.2 Der Grenzfall $s \rightarrow 0$

Folgende Entwicklungen um  $s = 0$  erweisen sich im weiteren Verlauf als nützlich

$$\sqrt{1-s^2} = 1 - \frac{1}{2}s^2 + \mathcal{O}(s^4) , \tag{4.9}$$

$$\ln \left( 1 + \left[ -\frac{1}{4}s^2 + \mathcal{O}(s^4) \right] \right) = -\frac{1}{4}s^2 + \mathcal{O}(s^4) , \tag{4.10}$$

$$e^{-\frac{n+1}{4}s^2 + \mathcal{O}(s^4)} = 1 - \frac{n+1}{4}s^2 + \mathcal{O}(s^4) . \tag{4.11}$$

Man entwickelt nun zuerst den Ausdruck  $\cosh^{-1}\left(\frac{1}{s}\right)$  um  $s = 0$  und bekommt

$$\begin{aligned}
 \cosh^{-1}\left(\frac{1}{s}\right) &= \ln\left(\frac{1}{s} + \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}\right) \\
 &= \ln\left(\frac{1}{s} \left[1 + \sqrt{1 - s^2}\right]\right) \\
 &= \ln\left(\frac{1}{s}\right) + \ln\left(1 + \sqrt{1 - s^2}\right) \\
 &\stackrel{(4.9)}{=} -\ln(s) + \ln\left(2 - \frac{1}{2}s^2 + \mathcal{O}(s^4)\right) \\
 &= -\ln(s) + \ln(2) + \ln\left(1 - \frac{1}{4}s^2 + \mathcal{O}(s^4)\right) \\
 &\stackrel{(4.10)}{=} -\ln(s) + \ln(2) - \frac{1}{4}s^2 + \mathcal{O}(s^4) .
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

Damit ergibt sich dann

$$\begin{aligned}
 \cosh^{-1}\left(\frac{1}{s}\right) - \sqrt{1 - s^2} &\stackrel{(4.9)}{=} -\ln(s) + \ln(2) - \frac{1}{4}s^2 - 1 + \frac{1}{2}s^2 + \mathcal{O}(s^4) \\
 &= -\ln(s) + [\ln(2) - 1] + \frac{1}{4}s^2 + \mathcal{O}(s^4) .
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

Demnach lässt sich der führende Term für kleine  $s$  wie folgt nähern

$$\begin{aligned}
 T(s) &= e^{-(n+1)(\cosh^{-1}(\frac{1}{s}) - \sqrt{1-s^2})} \\
 &\stackrel{(4.13)}{=} e^{(n+1)\ln(s)} e^{-(n+1)(\ln(2)-1)} e^{-(n+1)\frac{1}{4}s^2 + \mathcal{O}(s^4)} \\
 &\stackrel{(4.11)}{=} s^{n+1} \frac{e^{n+1}}{2^{n+1}} \left(1 - \frac{n+1}{4}s^2 + \mathcal{O}(s^4)\right)
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

und man erhält den Ausdruck

$$\boxed{T(s) = \left(\frac{e}{2} \cdot s\right)^{n+1} \left(1 - \frac{n+1}{4}s^2 + \mathcal{O}(s^4)\right)} . \tag{4.15}$$

Für  $s \rightarrow 0$  geht  $T(x)$  also in etwa wie  $s^{n+1}$  gegen null.

## 4.3 Die Kink-Lösung

### 4.3.1 Berechnung der Kink-Lösung

Wie in Abschnitt 2.3 erläutert, bestimmt sich die Kink-Lösung  $x(t)$  aus der Differentialgleichung<sup>4</sup>

$$\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) = 0 . \tag{4.16}$$

<sup>4</sup>Die Größe  $x$  meint hier bis zur erneuten Einführung von  $\hat{x}$  im Verlauf von (4.17) tatsächlich  $x$ .

Für  $\hat{x} = \beta x$  ergibt sich hieraus die Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \dot{\hat{x}}^2 &= \beta^2 \dot{x}^2 \\ &\stackrel{(4.16)}{=} \beta^2 \frac{2}{m} V(x) \end{aligned} \quad (4.17)$$

$$\begin{aligned} &\stackrel{(3.2)}{=} \frac{\beta^4}{m^2} v(\hat{x}) \geq 0 \quad \forall \hat{x} \in \mathbb{R} \\ \Rightarrow \quad \dot{\hat{x}} &= \frac{\beta^2}{m} \sqrt{v(\hat{x})} . \end{aligned} \quad (4.18)$$

Es wird die neue Zeiteinheit  $\tau = \frac{\beta^2}{2m} t$  eingeführt<sup>5</sup>, sodass nun gilt

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{x}}{d\tau} &= \frac{2m}{\beta^2} \frac{d\hat{x}}{dt} \\ &\stackrel{(4.18)}{=} 2\sqrt{v(\hat{x})} . \end{aligned} \quad (4.19)$$

Im Weiteren meint  $\dot{x}$  die Ableitung nach  $\tau$  und  $\hat{x}$  wird nun wieder mit  $x$  und  $\tau$  mit  $t$  bezeichnet. Die zu lösende Differentialgleichung schreibt sich damit als

$$\begin{aligned} \dot{x} &= 2\sqrt{v(x)} \\ &= 2(n+1) |s \cdot \cosh(2x) - 1| . \end{aligned} \quad (4.20)$$

Für  $-a < x < a$ , den Bereich, in dem sich das Teilchen im umgekehrten Potenzial  $-V(x)$  bewegt, folgt nach (4.5)

$$\boxed{\dot{x} = -2(n+1)(s \cdot \cosh(2x) - 1)} . \quad (4.21)$$

Die Lösung wird durch Trennung der Variablen erreicht. Es gilt die Gleichung

$$\int_0^x dx' \frac{1}{s \cdot \cosh(2x') - 1} = - \int_{t_0}^t dt' 2(n+1) \quad \text{mit} \quad x(t=t_0) = 0 \quad (4.22)$$

zu lösen. Um das Integral auf der linken Seite berechnen zu können, führt man folgende Nebenrechnung durch

$$\begin{aligned} s \cdot \cosh(2x) - 1 &= s[\cosh^2(x) + \sinh^2(x)] - [\cosh^2(x) - \sinh^2(x)] \\ &= (s-1) \cosh^2(x) + (1+s) \sinh^2(x) \\ &= \cosh^2(x)(s-1) \left(1 + \frac{s+1}{s-1} \tanh^2(x)\right) \\ &= \cosh^2(x)(s-1) \left(1 - \frac{1+s}{1-s} \tanh^2(x)\right) \\ &= -\cosh^2(x)(1-s) \left(1 - \left[\sqrt{\frac{1+s}{1-s}} \tanh(x)\right]^2\right) . \end{aligned} \quad (4.23)$$

---

<sup>5</sup>Es gilt dann, dass  $\epsilon \cdot \tau = E \cdot t$  die Dimension einer Wirkung hat.

Unter Hinzuziehen der Substitution  $\sqrt{\frac{1+s}{1-s}} \tanh(x') = z$ ,  $dx' = \cosh^2(x') \sqrt{\frac{1-s}{1+s}} dz$  gelingt die Berechnung dieses Integrals folgenderweise

$$\begin{aligned}
 \int_0^x dx' \frac{1}{s \cosh(2x') - 1} &\stackrel{(4.23)}{=} - \int_0^x dx' \frac{1}{\cosh^2(x')(1-s)(1 - [\sqrt{\frac{1+s}{1-s}} \tanh(x')]^2)} \\
 &\stackrel{\text{Subst.}}{=} - \int_0^{\sqrt{\frac{1+s}{1-s}} \tanh(x)} dz \frac{\cosh^2(x') \sqrt{\frac{1-s}{1+s}}}{\cosh^2(x')(1-s)(1-z^2)} \frac{1}{(1-z^2)} \\
 &= - \sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \frac{1}{1-s} \left[ \tanh^{-1}(z) \right]_{z=0}^{z=\sqrt{\frac{1+s}{1-s}} \tanh(x)} \\
 &= - \frac{1}{\sqrt{1-s^2}} \tanh^{-1} \left( \sqrt{\frac{1+s}{1-s}} \tanh(x) \right) .
 \end{aligned} \tag{4.24}$$

Nun erfolgt die Berechnung der rechten Seite der Gleichung (4.22):

$$- \int_{t_0}^t dt' 2(n+1) = -2(n+1)(t-t_0) . \tag{4.25}$$

Einsetzen der Ergebnisse in (4.22) liefert den Zusammenhang

$$\frac{1}{\sqrt{1-s^2}} \cdot \tanh^{-1} \left( \sqrt{\frac{1+s}{1-s}} \tanh(x) \right) = 2(n+1)(t-t_0) . \tag{4.26}$$

Durch Auflösen nach  $x(t)$  ergibt sich die Kink-Lösung. Sie lautet:

$$\boxed{x(t) = \tanh^{-1} \left( \sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \tanh \left( 2(n+1)(t-t_0)\sqrt{1-s^2} \right) \right)} . \tag{4.27}$$

### 4.3.2 Überprüfung der Randbedingungen

Die gefundene Funktion  $x(t)$  muss den nachfolgenden Zusammenhang erfüllen:

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} x(t) = \pm a . \tag{4.28}$$

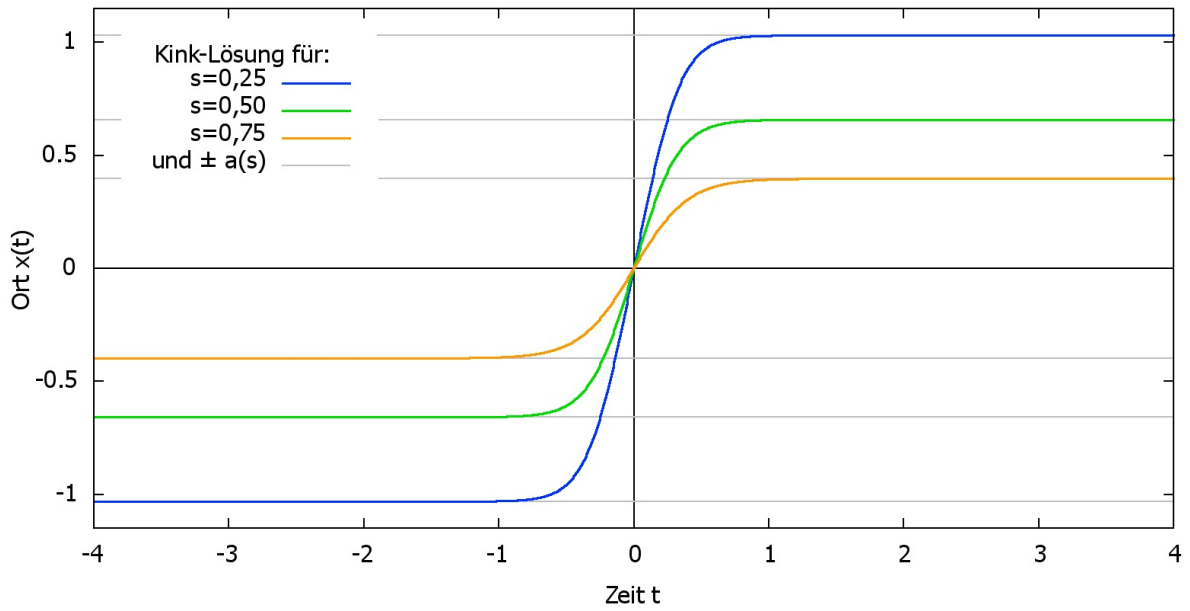
Die Funktion  $\tanh^{-1}(x)$  ist stetig auf  $x \in (-1, 1)$  und wegen  $s \in (0, 1)$  gilt hier stets

$$\sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \tanh \left( 2(n+1)(t-t_0)\sqrt{1-s^2} \right) \in (-1, 1) . \tag{4.29}$$

Mit  $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \tanh(x) = \pm 1$  ergibt sich daher

$$\begin{aligned}
 \lim_{t \rightarrow \pm\infty} x(t) &= \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \left\{ \tanh^{-1} \left( \sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \tanh \left( 2(n+1)(t-t_0)\sqrt{1-s^2} \right) \right) \right\} \\
 &= \tanh^{-1} \left( \sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \left[ \tanh \left( 2(n+1)(t-t_0)\sqrt{1-s^2} \right) \right] \right) \\
 &= \tanh^{-1} \left( \pm \sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \right) \\
 &= \frac{1}{2} \left\{ \ln \left( 1 \pm \sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \right) - \ln \left( 1 \mp \sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \right) \right\} \\
 &= \pm \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1}{s} + \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1} \right) \\
 &= \pm \frac{1}{2} \cosh^{-1} \left( \frac{1}{s} \right) \\
 &= \pm a .
 \end{aligned} \tag{4.30}$$

Die gefundene Funktion  $x(t)$  erfüllt somit wie gefordert die Bedingungen (4.28). Ein Plot der Kink-Lösung für verschiedene Werte des Parameters  $s$  findet sich in Abbildung 4.1 für  $n = 1$  und  $t_0 = 0$ .



**Abb. 4.1:** Plot der Kink-Lösung für verschiedene Werte des Parameters  $s$  mit  $n = 1$  und  $t_0 = 0$ . Der jeweilige Wert  $\pm a(s)$  ist grau eingezeichnet. Der asymptotische Verlauf der Lösung  $x(t)$  für  $|t| \rightarrow \infty$  ist deutlich erkennbar.

---

## 5 Quantenmechanische Rechnungen

In diesem Abschnitt findet die Bestimmung des exakten Ausdrucks für  $\Delta\epsilon$  für  $n = 1$  bis  $n = 5$  mithilfe quantenmechanischer Rechnungen statt. Die Lösung der Schrödingergleichung orientiert sich dabei stark an [4], wobei stets der Parameter  $s$  statt wie dort  $\xi$  verwendet wird.

### 5.1 Die Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung des vorliegenden Systems lautet<sup>1</sup>

$$\begin{aligned} E\psi(x) &= \left( \frac{p^2}{2m} + V(x) \right) \psi(x) \\ &= \left( -\frac{d^2}{dx^2} \frac{1}{2m} + V(x) \right) \psi(x) \end{aligned} \quad (5.1)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad 0 &= \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + 2m[E - V(x)] \psi(x) \\ 0 &= \beta^2 \frac{d^2}{d\hat{x}^2} \psi(\hat{x}) + \beta^2 [\epsilon - v(\hat{x})] \psi(\hat{x}) \\ 0 &= \psi''(x) + [\epsilon - v(x)] \psi(x) . \end{aligned} \quad (5.2)$$

Es wird das unverschobene Potenzial aus (3.8) verwendet

$$\begin{aligned} v(x) &= \frac{1}{2}(n+1)^2 \left[ s^2 (\cosh(4x) - 1) - 4s \cosh(2x) \right] \\ &= \frac{1}{2}(n+1)^2 \left[ 2s^2 \cosh^2(2x) - 4s \cosh(2x) - 2s^2 \right] \end{aligned} \quad (5.3)$$

und man erhält die Differentialgleichung

$$0 = \psi''(x) + \left( \epsilon - (n+1)^2 [s^2 \cosh^2(2x) - 2s \cosh(2x) - s^2] \right) \psi(x) . \quad (5.4)$$

Sie findet sich analog in [4] und wird dort mit einem Vorgehen, das der Sommerfeld Methode ähnelt, gelöst. Viele der im Folgenden durchgeführten Schritte und Ergebnisse sind ebenfalls in [4] zu finden, weswegen im Weiteren nur noch angemerkt wird, wenn etwas nicht in [4] zu finden ist oder davon abweicht.

### 5.2 Asymptotische Lösung

Die asymptotische Lösung für  $x \rightarrow \pm\infty$  wird mit dem folgenden Ansatz bestimmt

$$\psi_a''(x) - [(n+1)^2 s^2 \cosh^2(2x) - 2(n+1)s \cosh(2x) - (n+1)^2 s^2] \psi_a(x) = 0 . \quad (5.5)$$

---

<sup>1</sup>Die Größe  $x$  meint hier bis zur erneuten Einführung von  $\hat{x}$  im Verlauf von (5.2) tatsächlich  $x$ . Anschließend wird  $\hat{x}$  wie schon zuvor wieder mit  $x$  bezeichnet.

Diese Differentialgleichung wird durch die Funktion

$$\psi_a(x) = e^{-\frac{1}{2}(n+1)s \cosh(2x)} , \quad (5.6)$$

$$\psi'_a(x) = -(n+1)s \sinh(2x) \psi_a(x) , \quad (5.7)$$

$$\psi''_a(x) = \left( (n+1)^2 s^2 \sinh^2(2x) - 2(n+1)s \cosh(2x) \right) \psi_a(x) \quad (5.8)$$

gelöst. Man wählt daher für die Wellenfunktion  $\psi(x)$ , welche (5.4) lösen soll, den Ansatz:

$$\psi(x) = e^{-\frac{1}{2}(n+1)s \cosh(2x)} \phi(x) , \quad (5.9)$$

$$\psi'(x) = e^{-\frac{1}{2}(n+1)s \cosh(2x)} \left[ -(n+1)s \sinh(2x) \phi(x) + \phi'(x) \right] , \quad (5.10)$$

$$\begin{aligned} \psi''(x) = e^{-\frac{1}{2}(n+1)s \cosh(2x)} & \left[ \left( (n+1)^2 s^2 \sinh^2(2x) - 2(n+1)s \cosh(2x) \right) \phi(x) \right. \\ & \left. - 2(n+1)s \sinh(2x) \phi'(x) + \phi''(x) \right] . \end{aligned} \quad (5.11)$$

Einsetzen dieses Ansatzes in (5.4) liefert folgende Differentialgleichung für  $\phi(x)$ :

$$\begin{aligned} 0 = e^{-\frac{1}{2}(n+1)s \cosh(2x)} & \left\{ \left[ (n+1)^2 s^2 \sinh^2(2x) - 2(n+1)s \cosh(2x) \right. \right. \\ & \left. - (n+1)^2 s^2 \cosh^2(2x) + 2(n+1)^2 s \cosh(2x) \right. \\ & \left. \left. + (n+1)^2 s^2 + \epsilon \right] \phi(x) - 2(n+1)s \sinh(2x) \phi'(x) + \phi''(x) \right\} \end{aligned} \quad (5.12)$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{0 = \phi''(x) - 2s(n+1) \sinh(2x) \phi'(x) + \left( \epsilon + 2s n(n+1) \cosh(2x) \right) \phi(x)} . \quad (5.13)$$

### 5.3 Reihenansatz für $\phi(x)$

Man betrachtet nun diejenigen Lösungen von (5.13), welche sich als endliche Summen aus Sinus oder Kosinus Hyperbolicus von  $jx$  darstellen lassen, wobei  $j \in \mathbb{N}$ . Diese Lösungen sind

$$\phi(x) = \sum_{j=0}^k C_{2j+1} \cosh((2j+1)x) , \quad (5.14a)$$

$$\phi(x) = \sum_{j=0}^k C_{2j} \cosh(2jx) , \quad (5.14b)$$

$$\phi(x) = \sum_{j=0}^k S_{2j+1} \sinh((2j+1)x) , \quad (5.14c)$$

$$\phi(x) = \sum_{j=0}^k S_{2j} \sinh(2jx) . \quad (5.14d)$$

Durch Einsetzen dieser Lösungsansätze in (5.13) lassen sich Rekursionsbeziehungen für die jeweiligen Koeffizienten finden. Es werden die folgenden Additionstheoreme verwendet

$$2 \cosh(ax) \cosh(bx) = \cosh((a+b)x) + \cosh((a-b)x) , \quad (5.15a)$$

$$2 \sinh(ax) \sinh(bx) = \cosh((a+b)x) - \cosh((a-b)x) , \quad (5.15b)$$

$$2 \sinh(ax) \cosh(bx) = \sinh((a+b)x) + \sinh((a-b)x) , \quad (5.15c)$$

$$2 \cosh(ax) \sinh(bx) = \sinh((a+b)x) - \sinh((a-b)x) . \quad (5.15d)$$



## 5.4 Rekursionsrelationen

Für alle vier Ansätze in (5.14) führt ein analoges Vorgehen zur gesuchten Rekursionsrelation für die Koeffizienten. Daher wird nur für den Ansatz (5.14a) hier eine ausführliche Rechnung durchgeführt und für die übrigen Ansätze sofort das Ergebnis angegeben.

In [4] findet sich weder eine ausführliche Rechnung, noch die Rekursionsrelationen zu den Ansätzen (5.14c) und (5.14d). Die dort angegebenen Relationen für die Koeffizienten in (5.14a) und (5.14b) scheinen für  $1 \leq j \leq k$  gültig zu sein<sup>2</sup>, allerdings weicht der Zusammenhang für (5.14b) von dem in dieser Arbeit unter (5.21) gefundenen geringfügig ab. Berechnet man jedoch aus den im weiteren Verlauf dieses Kapitels erhaltenen Rekursionsrelationen die Eigenenergien (und Funktionen), so stimmen die Ergebnisse mit denen in [4] überein.

Verwendet man den Ansatz (5.14a), so wird (5.13) unter Anwendung von (5.15a) und (5.15b) zu

$$\begin{aligned}
0 = & \sum_{j=0}^k C_{2j+1} ((2j+1)^2 + \epsilon) \cosh((2j+1)x) \\
& + \sum_{j=0}^k C_{2j+1} s(n+1)(n-2j-1) \cosh((2j+3)x) \\
& + \sum_{j=0}^k C_{2j+1} s(n+1)(n+2j+1) \cosh((2j-1)x) .
\end{aligned} \tag{5.16}$$

Um eine einzelne Summe über  $A \cdot \cosh((2j+1)x)$  zu erhalten, verschiebt man die Summen, welche den Faktor  $\cosh((2(j \pm 1) + 1)x)$  enthalten, und es ergibt sich

$$\begin{aligned}
0 = & \sum_{j=0}^k C_{2j+1} ((2j+1)^2 + \epsilon) \cosh((2j+1)x) \\
& + \sum_{j=1}^{k+1} C_{2j-1} s(n+1)(n-2j+1) \cosh((2j+1)x) \\
& + \sum_{j=-1}^{k-1} C_{2j+3} s(n+1)(n+2j+3) \cosh((2j+1)x) .
\end{aligned} \tag{5.17}$$

Dies lässt sich durch Herausziehen einiger Terme aus den Summen umschreiben zu

$$\begin{aligned}
0 = & \sum_{j=0}^k C_{2j+1} ((2j+1)^2 + \epsilon) \cosh((2j+1)x) \\
& + \sum_{j=0}^k C_{2j-1} s(n+1)(n+1-2j) \cosh((2j+1)x) \\
& \quad + C_{2k+1} s(n+1)(n-1-2k) \cosh((2k+3)x) - C_{-1} s(n+1)^2 \cosh(x) \\
& + \sum_{j=0}^k C_{2j+3} s(n+1)(n+3+2j) \cosh((2j+1)x) \\
& \quad + C_1 s(n+1)^2 \cosh(-x) - C_{2k+3} s(n+1)(n+3+2k) \cosh((2k+1)x) .
\end{aligned} \tag{5.18}$$

<sup>2</sup>[4] macht keinerlei Angaben zum Gültigkeitsbereich.

Da nur endliche Reihen als Lösung betrachtet werden, kann man ohne Beschränkung der Allgemeinheit davon ausgehen, dass für  $j < 0$  oder  $j > k$  alle Koeffizienten  $C_{2j+1}$  gleich null sind. Dadurch fallen die Terme, die den Faktor  $C_{-1} = 0$  bzw.  $C_{2k+3} = 0$  enthalten weg. Der Term mit dem Faktor  $C_1$  lässt sich in die erste Summe einfügen, da gilt  $\cosh(-x) = \cosh(x)$ . Es ist außerdem bekannt, dass die Lösung keinen Term mit  $\cosh((2j+1)x)$  enthält mit  $j > k$ , sodass

$$n = 2k + 1 \quad (5.19)$$

gelten muss, damit der entsprechende Term in (5.18) verschwindet. Die Summe ist null, wenn alle Vorfaktoren verschwinden und man erhält die Rekursionsrelation

$$\left( (2j+1)^2 + \epsilon + s(n+1)^2 \delta_{j0} \right) C_{2j+1} + s(n+1)(n+1-2j)C_{2j-1} + s(n+1)(n+3+2j)C_{2j+3} = 0. \quad (5.20)$$

Für den Ansatz (5.14b) erhält man mit  $n = 2k$  die Beziehung

$$\left( (2j)^2 + \epsilon \right) C_{2j} + 2s(n+1) \left( \frac{n}{2}(1 + \delta_{j1}) + 1 - j \right) C_{2j-2} + s(n+1)(n+2+2j)C_{2j+2} = 0. \quad (5.21)$$

Unter Verwendung von (5.15c) und (5.15d) ergibt sich für Ansatz (5.14c) mit  $n = 2k + 1$

$$\left( (2j+1)^2 + \epsilon - s(n+1)^2 \delta_{j0} \right) S_{2j+1} + s(n+1)(n+1-2j)S_{2j-1} + s(n+1)(n+3+2j)S_{2j+3} = 0 \quad (5.22)$$

und für Ansatz (5.14d) mit  $n = 2k$

$$\left( (2j)^2 + \epsilon \right) S_{2j} + 2s(n+1) \left( \frac{n}{2}(1 - \delta_{j1}) + 1 - j \right) S_{2j-2} + s(n+1)(n+2+2j)S_{2j+2} = 0. \quad (5.23)$$

Alle Rekursionsrelationen sind gültig für  $0 \leq j \leq k$  und alle Koeffizienten mit  $j \notin \{0, 1, \dots, k\}$  sind null.

## 5.5 Eigenenergien $\epsilon_i$ für $n = 1$ bis $n = 5$

Die verschiedenen Eigenenergien  $\epsilon_i(s)$ , die das Teilchen im Potenzial annehmen kann, werden nun für  $n = 1$  bis  $n = 5$  mithilfe der jeweiligen Rekursionsrelationen<sup>3</sup> für  $0 < j < k$  berechnet. Die Ergebnisse sind für  $n = 1, 2, 3$  in [4] angegeben, für  $n = 4$  sowie  $n = 5$  jedoch nicht. Bei der Berechnung wird im Folgenden mehrfach die Tatsache genutzt, dass die Determinante der Koeffizienten-Matrix null sein muss, damit das lineare Gleichungssystem von Null verschiedene Lösungen besitzt<sup>4</sup>. Als Erstes erfolgt die Berechnung für  $n = 1, 2, 3$ .

<sup>3</sup>(5.20) und (5.22) für ungerade und (5.21) und (5.23) für gerade  $n$ .

<sup>4</sup>Dies gilt für den Fall, dass  $0 = M \cdot K$ , wobei  $K$  ein Spaltenvektor ist, der als Einträge die  $a$  verschiedenen Unbekannten des Gleichungssystems enthält, und  $M$  die  $a \times a$ -Koeffizienten-Matrix.

**n = 1**

$j = 0 \quad 0 = (1 + \epsilon + 4s) C_1$ $\Rightarrow \quad \epsilon = -(4s + 1)$	$0 = (1 + \epsilon - 4s) S_1$ $\Rightarrow \quad \epsilon = 4s - 1$
---	--

**n = 2**

$j = 0 \quad 0 = \epsilon C_0 + 12s C_2$ $j = 1 \quad 0 = (4 + \epsilon) C_2 + 12s C_0$ $\Rightarrow \quad 0 = \begin{pmatrix} \epsilon & 12s \\ 12s & 4 + \epsilon \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C_0 \\ C_2 \end{pmatrix}$ $0 = \epsilon(4 + \epsilon) - 12^2 s^2$ $0 = \epsilon^2 + 4\epsilon - 144s^2$ $\epsilon_{\pm} = 2(\pm\sqrt{1 + 36s^2} - 1)$	$0 = \epsilon S_0 + 12s S_2$ $0 = (4 + \epsilon) S_2 = 0$ $\Rightarrow \quad \epsilon = -4$
--	---

**n = 3**

$j = 0 \quad 0 = (1 + \epsilon + 16s) C_1 + 24s C_3$ $j = 1 \quad 0 = (9 + \epsilon) C_3 + 8s C_1$ $\Rightarrow \quad 0 = \begin{pmatrix} 1 + \epsilon + 16s & 24s \\ 8s & 9 + \epsilon \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C_1 \\ C_3 \end{pmatrix}$ $0 = (1 + \epsilon + 16s)(9 + \epsilon) - 8 \cdot 24s^2$ $0 = \epsilon^2 + (10 + 16s)\epsilon + 9 + 144s - 192s^2$ $\epsilon_{\pm} = -5 - 8s \pm 4\sqrt{1 - 4s + 16s^2}$	$0 = (1 + \epsilon - 16s) S_1 + 24s S_3$ $0 = (9 + \epsilon) S_3 + 8s S_1$ $0 = \begin{pmatrix} 1 + \epsilon - 16s & 24s \\ 8s & 9 + \epsilon \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} S_1 \\ S_3 \end{pmatrix}$ $0 = (1 + \epsilon - 16s)(9 + \epsilon) - 8 \cdot 24s^2$ $0 = \epsilon^2 + (10 - 16s)\epsilon + 9 - 144s - 192s^2$ $\epsilon_{\pm} = -5 + 8s \pm 4\sqrt{1 + 4s + 16s^2}$
---	---

Die so gefundenen Eigenenergien sind aus Gründen der Übersichtlichkeit nachfolgend in aufsteigender Reihenfolge aufgelistet.

$n = 1$	$\epsilon_0 = -(4s + 1)$ $\epsilon_1 = 4s - 1$	
$n = 2$	$\epsilon_0 = -2(\sqrt{1 + 36s^2} + 1)$ $\epsilon_1 = -4$ $\epsilon_2 = 2(\sqrt{1 + 36s^2} - 1)$	(5.24)
$n = 3$	$\epsilon_0 = -5 - 8s - 4\sqrt{1 - 4s + 16s^2}$ $\epsilon_1 = -5 + 8s - 4\sqrt{1 + 4s + 16s^2}$ $\epsilon_2 = -5 - 8s + 4\sqrt{1 - 4s + 16s^2}$ $\epsilon_3 = -5 + 8s + 4\sqrt{1 + 4s + 16s^2}$	

Die hieraus resultierenden Ergebnisse für die Energieaufspaltung finden sich in Kapitel 6 unter (6.2).

Für **n = 4** folgen aus (5.23) die Zusammenhänge

$$\begin{aligned} j = 0 & \quad \epsilon S_0 + 30s S_2 = 0 \\ j = 1 & \quad (4 + \epsilon) S_2 + 40s S_4 = 0 \\ j = 2 & \quad (16 + \epsilon) S_4 + 10s S_2 = 0 . \end{aligned} \quad (5.25)$$

Diese lassen sich zusammenfassend auch schreiben als

$$\begin{pmatrix} \epsilon & 30s & 0 \\ 0 & 4 + \epsilon & 40s \\ 0 & 10s & 16 + \epsilon \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} S_0 \\ S_2 \\ S_4 \end{pmatrix} = 0 . \quad (5.26)$$

Aus der Bedingung, dass die Determinante der Koeffizientenmatrix verschwinden muss, ergibt sich

$$\epsilon[(4 + \epsilon)(16 + \epsilon) - 400s^2] = 0 \quad (5.27)$$

und daraus entweder  $\epsilon = 0$ , was nicht von Interesse ist, da die zugehörige Wellenfunktion konstant null wäre, oder die Lösungen

$$\boxed{\epsilon_{\pm} = 2(-5 \pm \sqrt{9 + 100s^2})} . \quad (5.28)$$

Für den Reihenansatz aus Kosinus Hyperbolicus-Termen besagt (5.21)

$$\begin{aligned} j = 0 & \quad \epsilon C_0 + 30s C_2 = 0 \\ j = 1 & \quad (4 + \epsilon) C_2 + 40s C_0 + 40s C_4 = 0 \\ j = 2 & \quad (16 + \epsilon) C_4 + 10s C_2 = 0 \end{aligned} \quad (5.29)$$

woraus folgt

$$\begin{pmatrix} \epsilon & 30s & 0 \\ 40s & 4 + \epsilon & 40s \\ 0 & 10s & 16 + \epsilon \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C_0 \\ C_2 \\ C_4 \end{pmatrix} = 0 . \quad (5.30)$$

Die hieraus hervorgehende Gleichung lässt sich nicht wie oben in  $\epsilon = 0$  und eine quadratische Gleichung aufteilen und lösen, da hier der erste Eintrag der zweiten Zeile der Koeffizientenmatrix ungleich null ist. Es ergibt sich eine kubische Gleichung

$$0 = \epsilon^3 + 20\epsilon^2 + (64 - 1600s^2)\epsilon - 19200s^2 , \quad (5.31)$$

deren Lösungen mithilfe der Cardanischen Formeln [5] gefunden werden können.

Durch Einführen von  $z = \epsilon + \frac{20}{3}$  reduziert sich (5.31) auf

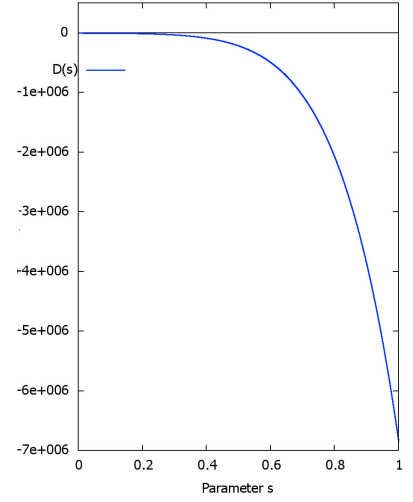
$$0 = z^3 + pz + q \quad \text{mit} \quad \boxed{p = -1600s^2 - \frac{208}{3}} \quad \text{und} \quad \boxed{q = \frac{4480}{27} - \frac{25600}{3}s^2} . \quad (5.32)$$

Wie sich in Abbildung 5.1 zeigt, ist die Diskriminante  $D = (\frac{q}{2})^2 + (\frac{p}{3})^3$  im Intervall  $s \in (0, 1)$  stets negativ. Damit existieren drei reelle Lösungen zu (5.32), die sich wie folgt ergeben

$$\begin{aligned} z_{\pm} &= -\sqrt{-\frac{4}{3}p} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(-\frac{q}{2}\sqrt{-\frac{27}{p^3}}\right) \pm \frac{\pi}{3}\right) \\ z_0 &= \sqrt{-\frac{4}{3}p} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(-\frac{q}{2}\sqrt{-\frac{27}{p^3}}\right)\right) . \end{aligned} \quad (5.33)$$

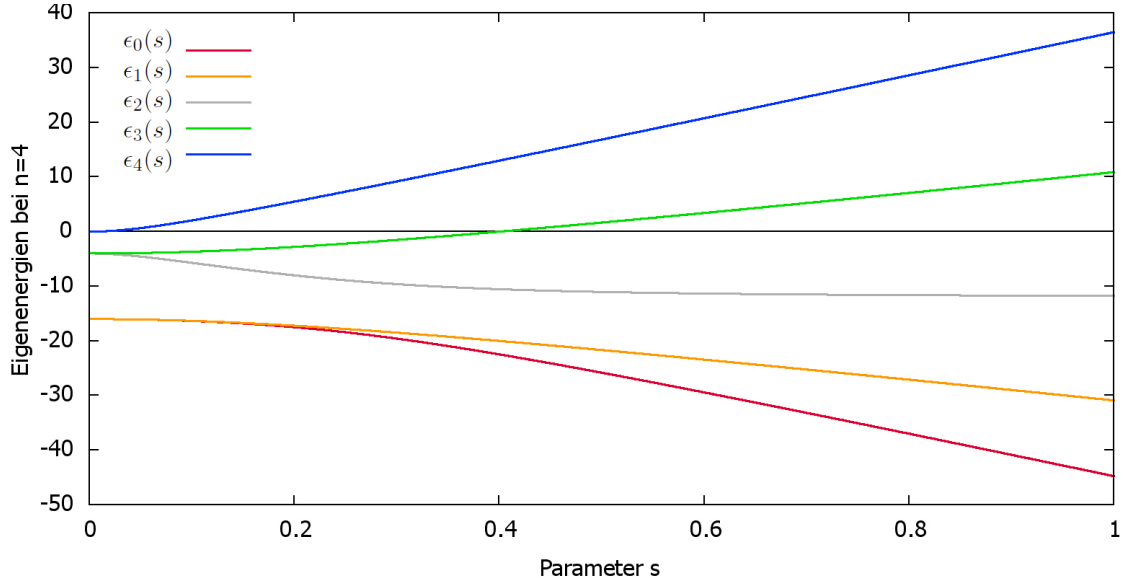
Es liegen also die folgenden fünf verschiedenen Eigenenergien vor

$$\begin{aligned}
 \epsilon_0 &= -\sqrt{-\frac{4}{3}p} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(-\frac{q}{2}\sqrt{-\frac{27}{p^3}}\right) - \frac{\pi}{3}\right) - \frac{20}{3} \\
 \epsilon_1 &= 2(-5 - \sqrt{9 + 100s^2}) \\
 \epsilon_2 &= -\sqrt{-\frac{4}{3}p} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(-\frac{q}{2}\sqrt{-\frac{27}{p^3}}\right) + \frac{\pi}{3}\right) - \frac{20}{3} \\
 \epsilon_3 &= 2(-5 + \sqrt{9 + 100s^2}) \\
 \epsilon_4 &= \sqrt{-\frac{4}{3}p} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(-\frac{q}{2}\sqrt{-\frac{27}{p^3}}\right)\right) - \frac{20}{3}.
 \end{aligned} \tag{5.34}$$



Da auf den ersten Blick nicht sofort einsichtig ist, dass die Energien in 5.34 aufsteigend geordnet sind, ist ihr Verlauf mit  $s$  in Abbildung 5.2 gezeigt.

**Abb. 5.1:** Die Diskriminante für  $n = 4$ .



**Abb. 5.2:** Die fünf verschiedenen Eigenenergien bei  $n = 4$ .

Für  $n = 5$  ergeben (5.20) und (5.21) die Zusammenhänge

$$\begin{pmatrix} 1 + \epsilon + 36s & 48s & 0 \\ 24s & 9 + \epsilon & 60s \\ 0 & 12s & 25 + \epsilon \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C_1 \\ C_3 \\ C_5 \end{pmatrix} = 0 \tag{5.35}$$

$$\Rightarrow \epsilon^3 + \epsilon^2(35 + 36s) + \epsilon(259 + 1224s - 1872s^2) - 45(-5 - 180s + 656s^2 + 576s^3) = 0 \tag{5.36}$$

$$\begin{pmatrix} 1 + \epsilon - 36s & 48s & 0 \\ 24s & 9 + \epsilon & 60s \\ 0 & 12s & 25 + \epsilon \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} S_1 \\ S_3 \\ S_5 \end{pmatrix} = 0 \tag{5.37}$$

$$\Rightarrow \epsilon^3 + \epsilon^2(35 - 36s) + \epsilon(259 - 1224s - 1872s^2) + 45(5 - 180s - 656s^2 + 576s^3) = 0. \tag{5.38}$$

Aus (5.36) ergibt sich mit  $z_c = \epsilon + \frac{35+36s}{3}$  die Gleichung

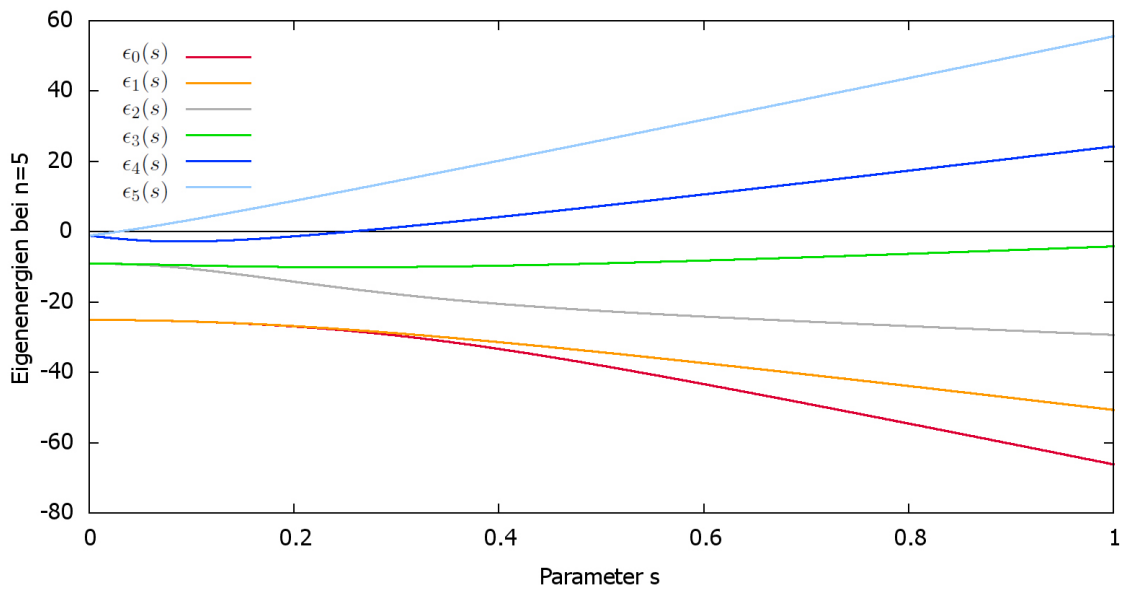
$$0 = z_c^3 + p_c z_c + q_c \quad \text{mit} \quad \begin{cases} p_c = -\frac{448}{3} + 384s - 2304s^2, \\ q_c = \frac{10240}{27} + 512s - 12288s^2 \end{cases} \quad (5.39)$$

und aus (5.38) mit  $z_s = \epsilon + \frac{35-36s}{3}$

$$0 = z_s^3 + p_s z_s + q_s \quad \text{mit} \quad \begin{cases} p_s = -\frac{448}{3} - 384s - 2304s^2, \\ q_s = \frac{10240}{27} - 512s - 12288s^2. \end{cases} \quad (5.40)$$

Die Diskriminanten sind wieder auf  $s \in (0, 1)$  überall negativ und die sich nach (5.33) ergebenden Eigenwerte, deren Verlauf sich in Abbildung 5.3 findet, lauten

$$\begin{aligned} \epsilon_0 &= -\sqrt{-\frac{4}{3}p_c} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(-\frac{q_c}{2} \sqrt{-\frac{27}{p_c^3}}\right) - \frac{\pi}{3}\right) - \frac{35+36s}{3} \\ \epsilon_1 &= -\sqrt{-\frac{4}{3}p_s} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(-\frac{q_s}{2} \sqrt{-\frac{27}{p_s^3}}\right) - \frac{\pi}{3}\right) - \frac{35-36s}{3} \\ \epsilon_2 &= -\sqrt{-\frac{4}{3}p_c} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(-\frac{q_c}{2} \sqrt{-\frac{27}{p_c^3}}\right) + \frac{\pi}{3}\right) - \frac{35+36s}{3} \\ \epsilon_3 &= -\sqrt{-\frac{4}{3}p_s} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(-\frac{q_s}{2} \sqrt{-\frac{27}{p_s^3}}\right) + \frac{\pi}{3}\right) - \frac{35-36s}{3} \\ \epsilon_4 &= \sqrt{-\frac{4}{3}p_c} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(-\frac{q_c}{2} \sqrt{-\frac{27}{p_c^3}}\right)\right) - \frac{35+36s}{3} \\ \epsilon_5 &= \sqrt{-\frac{4}{3}p_s} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(-\frac{q_s}{2} \sqrt{-\frac{27}{p_s^3}}\right)\right) - \frac{35-36s}{3}. \end{aligned} \quad (5.41)$$



**Abb. 5.3:** Die sechs verschiedenen Eigenenergien bei  $n = 5$ .

## 6 Vergleich der Ergebnisse

Dieser Abschnitt betrachtet die Ergebnisse aus den beiden vorherigen Rechnungen, der semi-klassischen und der quantenmechanischen. Es wird versucht, durch einen Vergleich der Resultate der Gestalt des Korrekturfaktors  $\kappa(s)$  auf die Spur zu kommen.

Aus den semiklassischen Rechnungen ist nach (4.7) und (4.8) bekannt, dass für jedes  $n \in \mathbb{N}$  gilt

$$\Delta\epsilon(s) = 2\kappa(s)T(s) = 2\kappa(s) \left( \frac{s}{1 + \sqrt{1 - s^2}} \right)^{(n+1)} e^{(n+1)\sqrt{1-s^2}}. \quad (6.1)$$

Die quantenmechanischen Rechnungen aus Kapitel 5 ergeben nach (5.24), (5.34) und (5.41) für die Energieaufspaltung  $\Delta\epsilon_{qm}(s) = \epsilon_1(s) - \epsilon_0(s)$

$$\begin{aligned} n=1 \quad & \Delta\epsilon_{qm}(s) = 8s \\ n=2 \quad & \Delta\epsilon_{qm}(s) = 2 \left( -1 + \sqrt{1 + 36s^2} \right) \\ n=3 \quad & \Delta\epsilon_{qm}(s) = 4 \left( 4s - \sqrt{1 + 4s + 16s^2} + \sqrt{1 - 4s + 16s^2} \right) \\ n=4 \quad & \Delta\epsilon_{qm}(s) = -2 \left( \frac{5}{3} + \sqrt{9 + 100s^2} \right) \\ & + \sqrt{-\frac{4}{3}p} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( -\frac{q}{2} \sqrt{-\frac{27}{p^3}} \right) - \frac{\pi}{3} \right) \\ n=5 \quad & \Delta\epsilon_{qm}(s) = -\sqrt{-\frac{4}{3}p_s} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( -\frac{q_s}{2} \sqrt{-\frac{27}{p_s^3}} \right) - \frac{\pi}{3} \right) \\ & + \sqrt{-\frac{4}{3}p_c} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( -\frac{q_c}{2} \sqrt{-\frac{27}{p_c^3}} \right) - \frac{\pi}{3} \right) + 24s. \end{aligned} \quad (6.2)$$

### 6.1 Abschätzung der Korrektur $\kappa(s)$

Es besteht nach (6.1) der Zusammenhang

$$\Delta\epsilon(s) = 2\kappa(s)T(s) \quad (6.3)$$

$$\Rightarrow \kappa(s) = \frac{\Delta\epsilon}{2T(s)}. \quad (6.4)$$

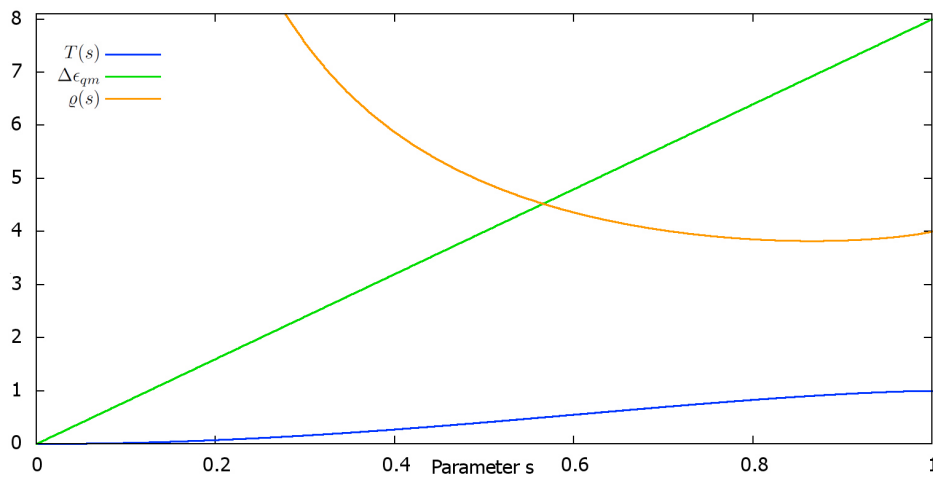
Würde es sich bei (6.3) nicht um eine Näherung handeln, so könnte man durch Einsetzen der exakten quantenmechanischen Ergebnisse für  $\Delta\epsilon(s)$  den Korrekturterm aus (6.4) erhalten. So bekommt man durch dieses Vorgehen jedoch lediglich eine Abschätzung der Korrektur  $\kappa(s)$  für verschiedene Werte von  $n$ . Diese Abschätzung soll hier im weiteren als

$$\varrho(s) = \frac{\Delta\epsilon_{qm}(s)}{2T(s)} \quad (6.5)$$

bezeichnet werden. Es ergibt sich

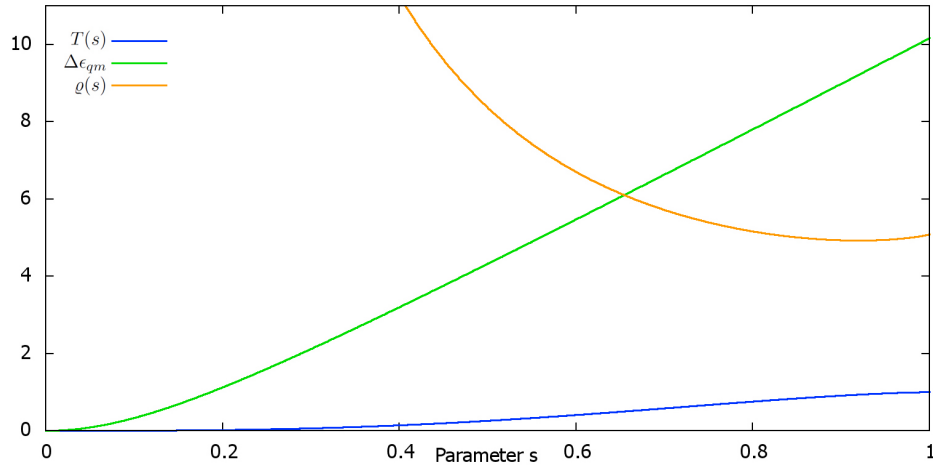
$$\begin{aligned}
n=1 \quad \varrho(s) &= \frac{4}{s} \left(1 + \sqrt{1-s^2}\right)^2 e^{-2\sqrt{1-s^2}} \\
n=2 \quad \varrho(s) &= \frac{1}{s^3} \left(-1 + \sqrt{1+36s^2}\right) \left(1 + \sqrt{1-s^2}\right)^3 e^{-3\sqrt{1-s^2}} \\
n=3 \quad \varrho(s) &= \frac{2}{s^4} \left(4s - \sqrt{1+4s+16s^2} + \sqrt{1-4s+16s^2}\right) \left(1 + \sqrt{1-s^2}\right)^4 e^{-4\sqrt{1-s^2}} \\
n=4 \quad \varrho(s) &= \left[ -\left(\frac{5}{3} + \sqrt{9+100s^2}\right) + \sqrt{-\frac{1}{3}p} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(-\frac{q}{2}\sqrt{-\frac{27}{p^3}}\right) - \frac{\pi}{3}\right) \right] \\
&\quad \cdot \frac{(1 + \sqrt{1-s^2})^5}{s^5} e^{-5\sqrt{1-s^2}} \\
n=5 \quad \varrho(s) &= \left[ 12s - \sqrt{-\frac{1}{3}p_s} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(-\frac{q_s}{2}\sqrt{-\frac{27}{p_s^3}}\right) - \frac{\pi}{3}\right) \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{-\frac{1}{3}p_c} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(-\frac{q_c}{2}\sqrt{-\frac{27}{p_c^3}}\right) - \frac{\pi}{3}\right) \right] \\
&\quad \cdot \frac{(1 + \sqrt{1-s^2})^6}{s^6} e^{-6\sqrt{1-s^2}}.
\end{aligned} \tag{6.6}$$

Ein Plot der exakten quatenmechanischen Lösung  $\Delta\epsilon_{qm}(s)$ , des führenden Terms der semiklassischen Näherung  $T(s)$  und der Abschätzung der Korrektur  $\varrho(s)$  findet sich für verschiedene  $n$  in den Abbildungen 6.1 bis 6.5. Es ist ersichtlich, dass es sich bei  $\varrho$  um eine Funktion sowohl von  $s$  als auch von  $n$  handelt, die zwar für alle  $n$  einen ähnlichen, aber doch nicht identischen Verlauf aufweist.

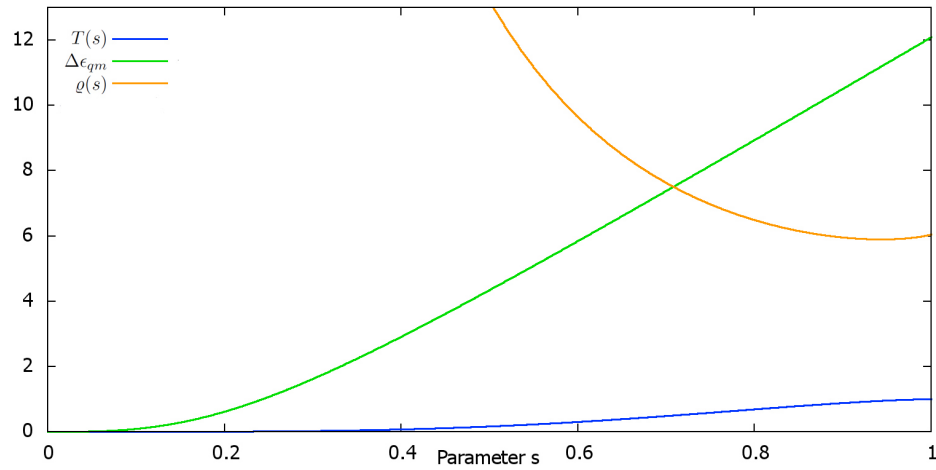


**Abb. 6.1:** Die exakte quatenmechanisch berechnete Energieaufspaltung  $\Delta\epsilon_{qm}$ , der führende Term der semiklassischen Näherung  $T(s)$  und das Verhältnis  $\varrho(s)$  für  $\mathbf{n} = \mathbf{1}$ .

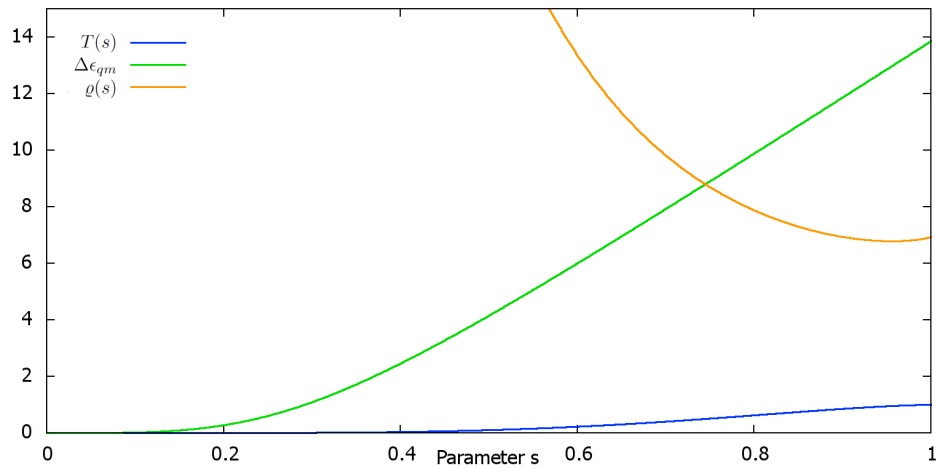




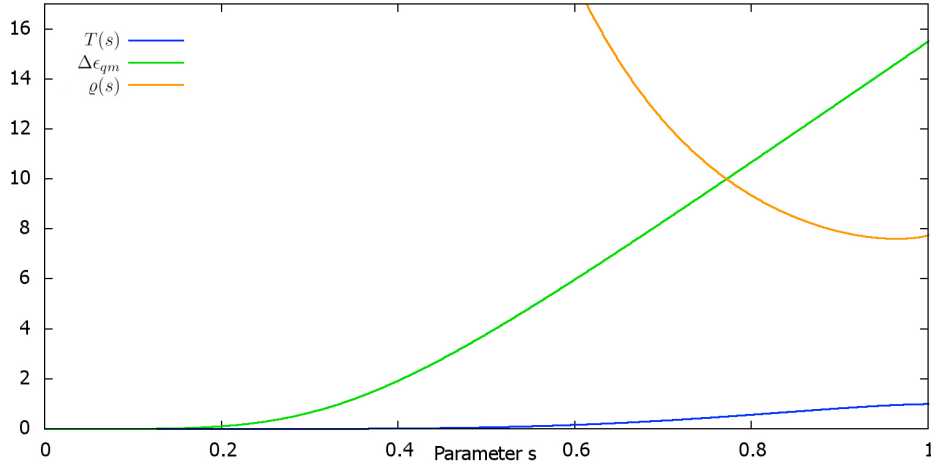
**Abb. 6.2:** Die exakte quantenmechanisch berechnete Energieaufspaltung  $\Delta\epsilon_{qm}$ , der führende Term der semiklassischen Näherung  $T(s)$  und das Verhältnis  $\rho(s)$  für  $\mathbf{n} = \mathbf{2}$ .



**Abb. 6.3:** Die exakte quantenmechanisch berechnete Energieaufspaltung  $\Delta\epsilon_{qm}$ , der führende Term der semiklassischen Näherung  $T(s)$  und das Verhältnis  $\rho(s)$  für  $\mathbf{n} = \mathbf{3}$ .



**Abb. 6.4:** Die exakte quantenmechanisch berechnete Energieaufspaltung  $\Delta\epsilon_{qm}$ , der führende Term der semiklassischen Näherung  $T(s)$  und das Verhältnis  $\rho(s)$  für  $\mathbf{n} = \mathbf{4}$ .



**Abb. 6.5:** Die exakte quantenmechanisch berechnete Energieaufspaltung  $\Delta\epsilon_{qm}$ , der führende Term der semiklassischen Näherung  $T(s)$  und das Verhältnis  $\varrho(s)$  für  $\mathbf{n} = 5$ .

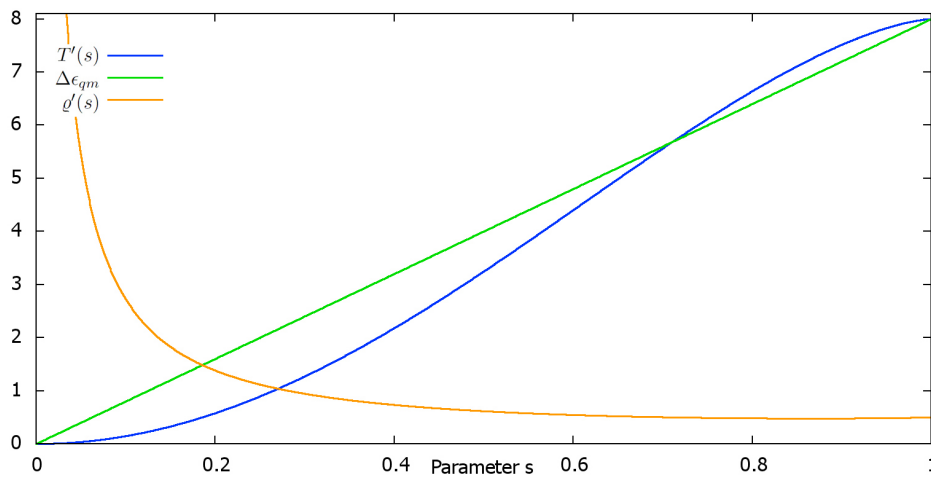
Einen besseren Eindruck von der Natur des Korrekturfaktors gewinnt man, wenn man die neuen Größen

$$\varrho'(s) = \frac{1}{2(n+3)}\varrho(s) \quad \text{und} \quad T'(s) = 2(n+3)T(s) \quad (6.7)$$

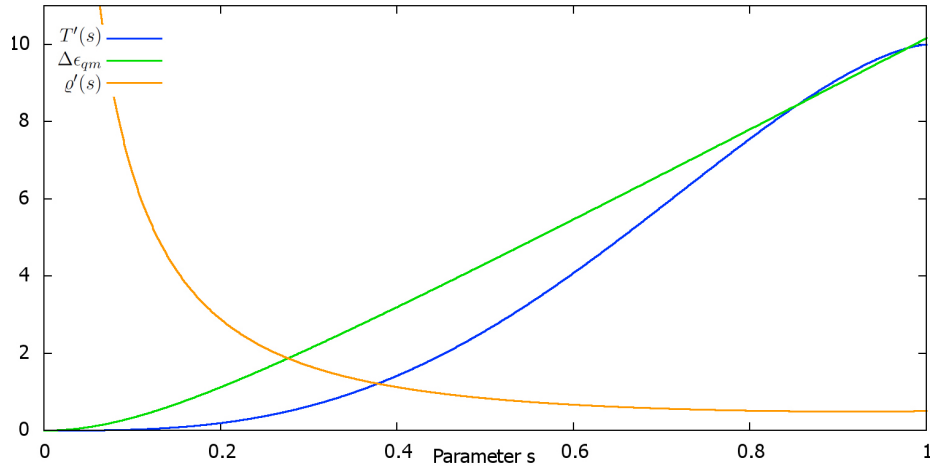
einführt, wodurch gilt

$$\Delta\epsilon_{qm}(s) = 2\varrho'(s) \cdot T'(s) . \quad (6.8)$$

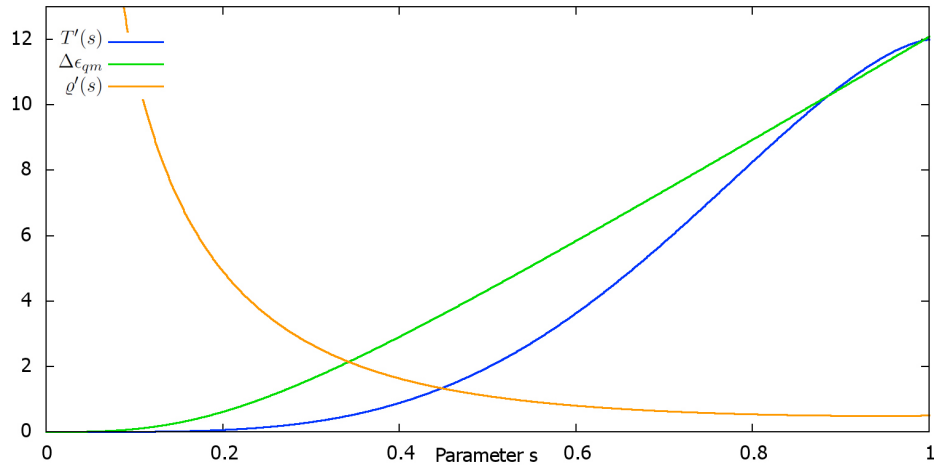
Ein Plot der Größen  $\Delta\epsilon(s)$ ,  $\varrho'(s)$  und  $T'(s)$  ist in den Abbildungen 6.6 bis 6.10 zu sehen. Es ist erkennbar, dass der grundsätzliche Verlauf der Energieaufspaltung  $\Delta\epsilon(s)$  mit  $s$  durch den Term  $T'(s)$  tatsächlich relativ gut wiedergegeben wird, dieser also zurecht als „führend“ bezeichnet wurde. Die Größe  $\varrho(s)$  bzw.  $\varrho'(s)$  zeigt für alle betrachteten  $n$  einen starken Anstieg für kleine  $s$ , der umso stärker wird, desto mehr man sich  $s = 0$  nähert. Für  $s \rightarrow 0$  scheint sie gegen unendlich zu gehen. Dieses Verhalten soll im nun folgenden Abschnitt genauer untersucht werden, bevor anschließend das andere Extrem,  $s \rightarrow 1$ , betrachtet wird.



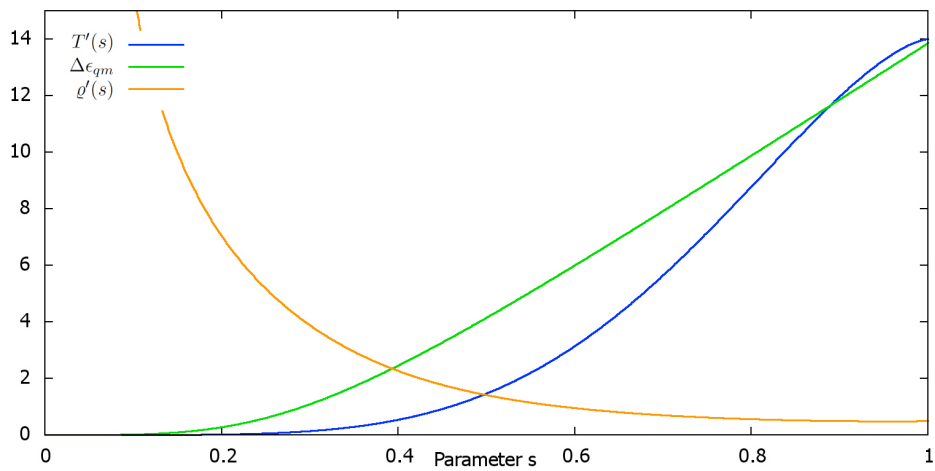
**Abb. 6.6:** Die neuen Größen  $T'(s)$  und  $\varrho'(s)$  sowie die exakte quantenmechanisch berechnete Energieaufspaltung  $\Delta\epsilon_{qm}(s)$  für  $\mathbf{n} = 1$ .



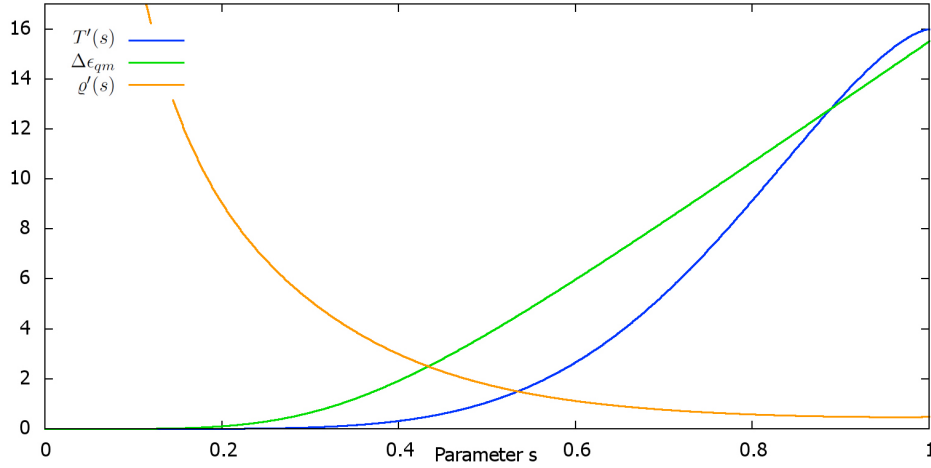
**Abb. 6.7:** Die neuen Größen  $T'(s)$  und  $\varrho'(s)$  sowie die exakte quantenmechanisch berechnete Energieaufspaltung  $\Delta\epsilon_{qm}(s)$  für  $\mathbf{n} = 2$ .



**Abb. 6.8:** Die neuen Größen  $T'(s)$  und  $\varrho'(s)$  sowie die exakte quantenmechanisch berechnete Energieaufspaltung  $\Delta\epsilon_{qm}(s)$  für  $\mathbf{n} = 3$ .



**Abb. 6.9:** Die neuen Größen  $T'(s)$  und  $\varrho'(s)$  sowie die exakte quantenmechanisch berechnete Energieaufspaltung  $\Delta\epsilon_{qm}(s)$  für  $\mathbf{n} = 4$ .



**Abb. 6.10:** Die neuen Größen  $T'(s)$  und  $\varrho'(s)$  sowie die exakte quantenmechanisch berechnete Energieaufspaltung  $\Delta\epsilon_{qm}(s)$  für  $n = 5$ .

## 6.2 Der Grenzfall $s \rightarrow 0$

Im Folgenden wird die asymptotische Form von  $\Delta\epsilon(s)$  und  $\varrho(s)$  für  $s \rightarrow 0$  betrachtet. Man nutzt die folgenden Entwicklungen um  $s = 0$

$$\sqrt{1 + as^2} = 1 + \frac{a}{2}s^2 + \mathcal{O}(s^4), \quad (6.9)$$

$$\sqrt{1 \pm as + (as)^2} = 1 \pm \frac{a}{2}s + \frac{3a^2}{8}s^2 \mp \frac{3a^3}{16}s^3 + \frac{3a^4}{128} + \mathcal{O}(s^5) \quad (6.10)$$

für die Fälle  $n = 2$  und  $n = 3$  und für die weiteren

$$\begin{aligned} n = 4 \quad \epsilon_0 &= -16 - \frac{100}{3}s^2 - \frac{3125}{27}s^4 + \mathcal{O}(s^6) \\ \epsilon_1 &= -16 - \frac{100}{3}s^2 + \frac{2500}{27}s^4 + \mathcal{O}(s^6) \\ n = 5 \quad \epsilon_0 &= -25 - 45s^2 - \frac{135}{16}s^4 - \frac{405}{2}s^5 - \frac{3645}{128}s^6 + \mathcal{O}(s^7) \\ \epsilon_1 &= -25 - 45s^2 - \frac{135}{16}s^4 + \frac{405}{2}s^5 - \frac{3645}{128}s^6 + \mathcal{O}(s^7). \end{aligned} \quad (6.11)$$

Für  $T(s)$  ist die asymptotische Form bereit aus (4.15) bekannt. Werden sowohl im Nenner als auch im Zähler von (6.5) Terme mit einer Ordnung höher als  $n + 1$  vernachlässigt, so folgt

$n = 1$	$\Delta\epsilon_{qm}(s) = 8s$	$\varrho(s) = \frac{2^4}{e^2} \cdot \frac{1}{s}$	(6.12)
$n = 2$	$\Delta\epsilon_{qm}(s) = 36s^2 + \mathcal{O}(s^4)$	$\varrho(s) = \frac{2^4 \cdot 3^2}{e^3} \cdot \frac{1}{s}$	
$n = 3$	$\Delta\epsilon_{qm}(s) = 96s^3 + \mathcal{O}(s^5)$	$\varrho(s) = \frac{2^8 \cdot 3}{e^4} \cdot \frac{1}{s}$	
$n = 4$	$\Delta\epsilon_{qm}(s) = \frac{5^4}{3}s^4 + \mathcal{O}(s^6)$	$\varrho(s) = \frac{2^4 \cdot 3^{-1} \cdot 5^4}{e^5} \cdot \frac{1}{s}$	
$n = 5$	$\Delta\epsilon_{qm}(s) = 3^4 \cdot 5 s^5 + \mathcal{O}(s^7)$	$\varrho(s) = \frac{2^5 \cdot 3^4 \cdot 5}{e^6} \cdot \frac{1}{s}$	

Die asymptotische Form von  $\Delta\epsilon(s)$  gleicht  $s^n$  und da  $T(s)$  sich für kleine  $s$  wie  $s^{(n+1)}$  verhält, zeigt das Verhältnis  $\varrho(s)$  eine von  $n$  unabhängige asymptotische Abhängigkeit von  $s$ , nämlich  $\varrho(s) \propto \frac{1}{s}$ . Die in (6.12) gefundenen Ausdrücke für  $\varrho(s)$  sind somit ein Indiz dafür, dass der tatsächliche Korrekturfaktor  $\kappa(s, n)$  für kleine  $s$  proportional zu  $\frac{1}{s}$  ist.

### 6.3 Der Grenzfall $s \rightarrow 1$

Der Wert, den das Verhältnis  $\varrho(s)$  für  $s = 1$  annimmt, ist endlich. Nach (6.6) beträgt er<sup>1</sup>

$n = 1$	$\varrho(s = 1) = 4$	
$n = 2$	$\varrho(s = 1) = 5,0828$	
$n = 3$	$\varrho(s = 1) = 6,0460$	(6.13)
$n = 4$	$\varrho(s = 1) = 6,9296$	
$n = 5$	$\varrho(s = 1) = 7,7548$	

Wie schon in der Definition von  $\varrho'(s)$  und  $T'(s)$  ausgenutzt wurde, um durch die Eigenschaft  $T'(s = 1) \approx \Delta\epsilon_{qm}(s = 1)$  eine besser Vergleichbarkeit zwischen führendem semiklassischen Term und exakter Energieaufspaltung zu erreichen, lässt sich erkennen, dass die Werte für  $\varrho(s = 1)$  sich für die hier betrachteten Fälle von  $n$  näherungsweise durch

$$\varrho(s = 1) \approx n + 3 \quad (6.14)$$

wiedergeben lassen. Dieser Zusammenhang entbehrt natürlich jeder theoretischen Grundlage und müsste durch die tatsächliche Berechnung des semiklassischen Vorfaktors überprüft werden. Er wird hier lediglich als Beobachtung aufgeführt und unterstützt die oben schon getroffene Aussage, dass  $\varrho$  und somit vermutlich auch  $\kappa$  eine Funktion beider Parameter  $s$  und  $n$  ist.

<sup>1</sup>Alle Ergebnisse ab  $n = 2$  sind auf vier Nachkommastellen gerundet.



---

## 7 Zusammenfassung

Die durchgeführte Analyse des Razavy-Potenzials ergab, dass ein Doppelmulden-Potenzial vorliegt, falls der neu eingeführte Parameter  $s$  aus dem Intervall  $(0, 1)$  gewählt wird. Die Lage seiner Minima ist nur von  $s$ , nicht jedoch vom zweiten Parameter  $n$  abhängig und die Höhe des Potenzialberges zwischen den Mulden nimmt mit wachsendem  $n$  und abnehmendem  $s$  zu. Nach [3] wird die in Kapitel 4 verwendete Näherung damit für kleine  $s$  und große  $n$  besser.

Die Berechnung des Exponential-Terms dieser Näherungsformel lies sich (nach vorangegangener Vereinfachung des Ausdrucks für das Potenzial in Kapitel 3) problemlos durchführen. Der Term weist für kleine  $s$  ein Verhalten wie  $s^{(n+1)}$  auf, was zusammen mit der Näherung der exakten Energieaufspaltung aus Abschnitt 5.5 für  $s \rightarrow 0$  Rückschlüsse auf das Verhalten des Vorfaktors  $K$  bzw.  $\kappa$  zuließ. Die Kink-Lösung konnte ebenfalls bestimmt werden und zeigt das erwartete Verhalten für  $x \rightarrow \pm\infty$ .

Die in Kapitel 5 durchgeführten quantenmechanischen Rechnungen konnten die in [4] angegebenen Ergebnisse für  $n = 1, 2, 3$  für die Eigenenergien eines Systems unter Einfluss des Razavy-Potenzials reproduzieren. Dabei mussten die zur Lösung verwendeten Rekursionsrelationen selbstständig hergeleitet werden, da sie in [4] nicht vollständig und erst für  $j > 0$  aufgelistet sind. Hierbei fiel auf, dass die in dieser Arbeit gefundene Relation (5.21) geringfügig von dem in [4] gegebenen Zusammenhang abweicht. Unter Verwendung der Cardanischen Formeln konnten zusätzlich die Eigenenergien für  $n = 4$  und  $n = 5$  exakt bestimmt und somit die Energieaufspaltung quantenmechanisch für  $n = 1$  bis  $n = 5$  berechnet werden.

Ein anschließender Vergleich der exakten quantenmechanischen Ergebnisse mit denen der Semiklassik ergab zunächst, dass für festes  $n$  der Exponential-Term der Näherung durch Multiplikation mit einem festen Wert so skaliert werden kann, dass sein Verlauf in etwa dem der exakten Energieaufspaltung entspricht. Dies weist drauf hin, dass der Faktor  $K$  bzw.  $\kappa$  tatsächlich nur eine korrigierende Wirkung auf den Verlauf der semiklassisch berechneten Energieaufspaltung mit  $s$  hat, ist jedoch nicht allzu aussagekräftig.

Um mehr über die Eigenschaften von  $\kappa$  zu erfahren, wurde das Verhältnis  $\varrho(s)$  von exakter Energieaufspaltung zu doppeltem Exponential-Term gebildet und gegen  $s$  aufgetragen. Es sollte für kleine  $s$  und große  $n$  eine besser werdende Näherung des tatsächlichen Faktors  $\kappa$  darstellen. Betrachtungen der Größe  $\varrho(s)$  für die verschiedenen  $n$  und  $s \rightarrow 0$  zeigten, dass stets ein Verhalten wie  $\frac{1}{s}$  für kleine  $s$  zu beobachten ist. Da wie erwähnt  $\varrho(s)$  mit abnehmendem  $s$  eine immer bessere Näherung des Faktors  $\kappa$  wird, ist zu erwarten, dass für kleine  $s$  gilt  $\kappa \propto \frac{1}{s}$ . Für  $s = 1$  nimmt das Verhältnis  $\varrho(s)$  endliche Werte an, die für die verschiedenen  $n$  nicht übereinstimmen. Es ist also wie vermutlich auch  $\kappa$  bzw.  $K$  sowohl eine Funktion von  $s$  als auch von  $n$ . Durch genaueres Betrachten der Werte bei  $s = 1$  lässt sich in etwa der Zusammenhang  $\varrho(s = 1) \approx n + 3$  erschließen, der hier jedoch nicht theoretisch begründet werden kann.

Insgesamt stehen mit dieser Arbeit die Grundlagen zu einer genaueren Überprüfung der semiklassischen Näherungsformel am Beispiel des Razavy-Potenzials zur Verfügung. Durch die Berechnung des Faktors  $K$  in einer weiterführenden Arbeit könnten die eben genannten Vermutungen zur Gestalt von  $\kappa(s, n)$  überprüft werden und auch, ob das hier berechnete Verhältnis  $\varrho$  wirklich für kleiner werdende  $s$  und größere  $n$  eine immer bessere Näherung von  $\kappa$  darstellt.

---

## Literaturverzeichnis

- [1] C. COHEN-TANNOUDJI, B. DIU, F. LALOË: *Quantenmechanik, Teil 1.* de Gruyter, 1. Auflage, 1997.
- [2] H. HAKEN, H. C. WOLF: *Molekülphysik und Quantenchemie*, Seite 201f. Springer, 4. Auflage, 2003.
- [3] MÜNSTER, G.: *Quantentheorie*, Kapitel 24. de Gruyter, 2. Auflage, 2010.
- [4] RAZAVY, M.: *An exactly soluble Schrödinger equation with a bistable potential.* Am. J. Phys., 48:285–288, 1980.
- [5] STÖCKER, H.: *Taschenbuch mathematischer Formeln und moderner Verfahren*, Seite 41. Verlag Harri Deutsch, 4. Auflage, 2007.

Zur Erstellung der Graphen und für einige Berechnung wurden folgende Programme verwendet:

- Wolfram: Mathematica 8.0
- Gnuplot Version 4.4 patchlevel 3



Hiermit versichere ich, diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie Zitate kenntlich gemacht zu haben.

Münster, den 25. Oktober 2011