

Bachelorarbeit im Fach Physik

Näherungsverfahren für die Energieaufspaltung im Doppelmuldenpotential

Dražen Radić
Matrikelnummer: 413138
drazen.radic94@gmail.com

Betreut von Prof. Dr. Gernot Münster
Zweitgutachter: Priv.-Doz. Dr. Jochen Heitger

Institut für Theoretische Physik
Westfälische Wilhelms-Universität Münster

30. September 2016

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	2
2 Berechnung der Energien	3
2.1 Berechnung der Normierung für $u_k(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3, \hat{x})$	6
2.2 Berechnung des potentiellen Anteils der Energie	8
2.3 Berechnung des kinetischen Anteils der Energie	10
2.4 Minimierung der Energie	16
3 Vergleich mit Zinn-Justin, Jentschura und Caswell	20
4 Die Funktionsweise eines Masers	26
5 Zusammenfassung und Diskussion der Ergebnisse	28

1 Einleitung

Das Doppelmuldenpotential kann für die Beschreibung einfacher Moleküle verwendet werden, es ist symmetrisch um den Ursprung herum und besitzt Minima an den Stellen $x = \pm a$. In dieser Arbeit ist das Doppelmuldenpotential gegeben durch

$$V(x) = \lambda(x^2 - a^2)^2.$$

Eine wichtiges Beispiel für ein Doppelmuldenpotential stellt das Ammoniak-Molekül NH_3 dar. Die drei Wasserstoffatome bilden bei diesem Molekül eine dreieckige Grundfläche und das Stickstoffatom befindet sich im Zustand minimaler Energie oberhalb beziehungsweise unterhalb des Mittelpunkts der Grundfläche in einem Abstand von a beziehungsweise $-a$ davon entfernt.

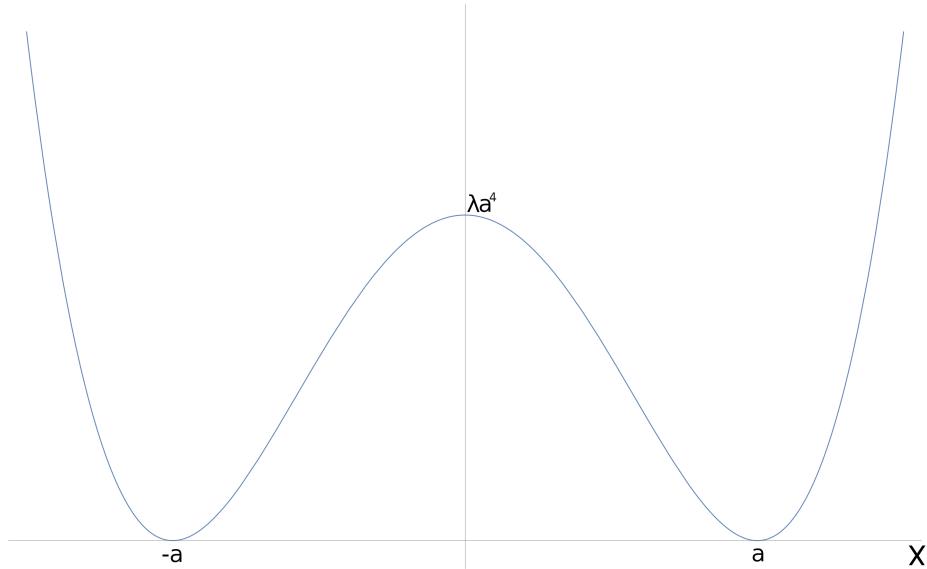


Abbildung 1: Das symmetrische Doppelmuldenpotential.

Klassisch gesehen besitzen beide Minima dieselbe Energie und ein Teilchen ist in einem der beiden Minima lokalisiert. Bei dem Ammoniak-Molekül werden diese beiden Zustände mit minimaler Energie auch als die *R*- und *L*-Konfiguration bezeichnet. Reicht die Energie des Teilchens nicht aus, um den Potentialwall, der die beiden Minima voneinander trennt, zu überwinden, so wird es in einer der beiden Mulden verbleiben. Der Übergang des Ammoniak-Moleküls aus der *R*- in die *L*-Konfiguration ist klassisch nur unter Aufbringung einer Energie in Höhe von etwa 0.4 eV möglich^[1].

Quantenmechanisch wird das Teilchen durch eine Wellenfunktion beschrieben und es besitzt in den Mulden die größte Aufenthaltswahrscheinlichkeit, die für beide Mulden identisch ist. Weiterhin ist das Atom aufgrund des Tunneleffekts in der Lage den Potentialwall bei viel geringeren Energien, als dies der Fall bei der klassischen Beschreibung ist, zu überwinden. Dieses Tunneln des Teilchens ist grundlegend für den Aufbau des Ammoniak-Masers.

Das Ziel dieser Arbeit ist es mit Hilfe des Ritz'schen Variationsprinzips die Energien des ersten angeregten Zustands und des Grundzustands zu berechnen und zu minimieren. Die minimierte Energie wird dann mit dem Ergebnis von Zinn-Justin und Jentschura, die einen Ansatz über das quantenmechanische Pfadintegral wählten, sowie mit dem Ergebnis von Caswell verglichen werden. Zum Schluss wird auf die Funktionsweise eines Masers eingegangen und die Energieaufspaltung eines Ammoniak-Moleküls mit der Variationsrechnung und der Pfadintegralmethode ermittelt werden.

2 Berechnung der Energien

In diesem Kapitel soll die Berechnung der Energie des Grundzustands und des ersten angeregten Zustands erfolgen. Hierfür werden zunächst die beiden Testwellenfunktionen aufgestellt und im Anschluss Umformungen durchgeführt, um das ganze Problem zu entdimensionalisieren. Die eigentliche Rechnung erfolgt dann in drei Unterabschnitten: einer für die Berechnung des Normierungsfaktors, einer für die Berechnung des potentiellen Anteils an der Energie und zuletzt einer für die Berechnung des kinetischen Anteils an der Energie.

Mit Hilfe des Ritz'schen Variationsprinzips und einer geeigneten Testwellenfunktion $|\psi\rangle$ ist man in der Lage eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie zu finden. Diese ist gegeben durch

$$E_0 \leq \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}, \quad (2.1)$$

mit dem hier verwendeten Hamiltonoperator $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \lambda(x^2 - a^2)^2$.

Der Beweis ist leicht auszuführen [2]:

Sei die Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung bekannt

$$H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \quad \text{mit } n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.2)$$

und es gelte $E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots$,

dann ist eine beliebige Testwellenfunktion $|\psi\rangle$ darstellbar in der Form

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle. \quad (2.3)$$

Der Eigenwert eines jeden Hamiltonoperators ist gegeben durch die Beziehung

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \sum_{m,n} c_m^* c_n \cdot \langle\phi_m|H|\phi_n\rangle \quad (2.4)$$

$$= \sum_{m,n} |c_n|^2 \cdot E_n \cdot \langle\phi_m|\phi_n\rangle \quad (2.5)$$

$$= \sum_n |c_n|^2 \cdot E_n \quad (2.6)$$

$$\geq E_0 \sum_n |c_n|^2. \quad (2.7)$$

Den Ausdruck $\sum_n |c_n|^2$ identifiziert man als $\langle\psi|\psi\rangle$ und durch Umstellen der obigen Ungleichung nach der Energie E_0 ergibt sich sofort die Aussage des Ritz'schen Variationsprinzips.

Analog findet man, dass für den ersten angeregten Zustand gilt

$$E_1 \leq \frac{\langle\chi|H|\chi\rangle}{\langle\chi|\chi\rangle}, \quad (2.8)$$

mit der zusätzlichen Bedingung, dass die Wellenfunktion des Grundzustands und des ersten angeregten Zustands orthonormiert sind.

Folgende Testwellenfunktionen wurden für den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand gewählt:

$$u_0(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, x) = A_+ \cdot (1 + \alpha_3 \cdot x^2) \cdot \left[\exp\left(-\frac{\alpha_1}{2}(x - \alpha_2)^2\right) + \exp\left(-\frac{\alpha_1}{2}(x + \alpha_2)^2\right) \right] \quad (2.9)$$

$$u_1(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, x) = A_- \cdot (1 + \alpha_3 \cdot x^2) \cdot \left[\exp\left(-\frac{\alpha_1}{2}(x - \alpha_2)^2\right) - \exp\left(-\frac{\alpha_1}{2}(x + \alpha_2)^2\right) \right] \quad (2.10)$$

Man überzeugt sich leicht davon, dass $\langle u_1(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, x) | u_0(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, x) \rangle = 0$ erfüllt ist, denn bei dem auftretenden Integral wird eine ungerade Funktion über symmetrische Grenzen integriert.

Die Wahl gerade dieser Testwellenfunktionen begründet sich dadurch, dass man die beiden Mulden des Potentials näherungsweise als harmonische Oszillatoren betrachten kann und die Wellenfunktion sich somit aus den Wellenfunktionen des bei a und $-a$ lokalisierten harmonischen Oszillators zusammensetzen. Der Einfachheit halber gehen die Wellenfunktion nur bis zur zweiten Ordnung in x und beschränken sich auf drei zu optimierende Parameter α_1, α_2 und α_3 . Die beiden Wellenfunktionen sind beispielhaft in der unten stehenden Abbildung dargestellt, alle Parameter wurden hierfür auf 1 gesetzt.

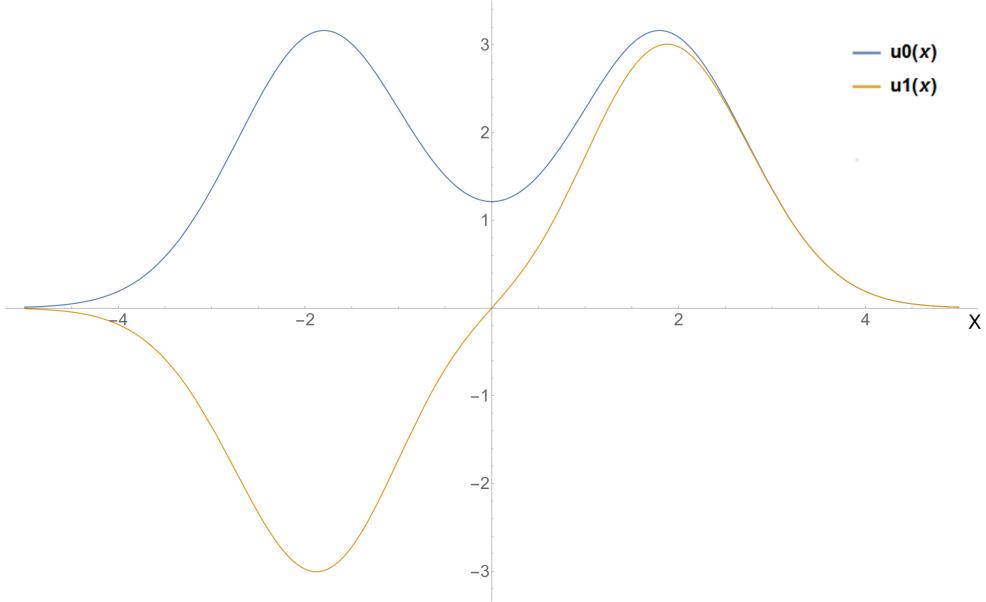


Abbildung 2: Die beiden Testwellenfunktionen $|u_0(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, x)\rangle$ und $|u_1(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, x)\rangle$.

Von zentraler Bedeutung für die Berechnung zahlreicher Integrale in dieser Arbeit ist das Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^n \cdot \exp(-b \cdot x^2) = \begin{cases} (-1)^{n/2} \cdot \frac{d^{n/2}}{db^{n/2}} \left(\sqrt{\frac{\pi}{b}} \right) & n = 0, 2, 4, \dots \\ 0 & n = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (2.11)$$

Im ersten Schritt sollen alle Größen in dem Hamiltonoperator und den Wellenfunktionen entdimensionalisiert werden:

$$H|u_i(x)\rangle = E_i \cdot |u_i(x)\rangle \quad (2.12)$$

$$\Leftrightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \lambda(x^2 - a^2)^2 \right) |u_i(x)\rangle = E_i \cdot |u_i(x)\rangle$$

$$\Leftrightarrow \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \lambda \frac{m}{\hbar^2} a^4 \left(\frac{x^2}{a^2} - 1 \right)^2 \right) |u_i(x)\rangle = \frac{m}{\hbar^2} E_i \cdot |u_i(x)\rangle$$

$$\Leftrightarrow \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \hat{x}^2 \cdot a^2} + \lambda \frac{m}{\hbar^2} a^4 (\hat{x}^2 - 1)^2 \right) |u_i(\hat{x})\rangle = \frac{m}{\hbar^2} E_i \cdot |u_i(\hat{x})\rangle \quad \text{mit } \hat{x} = x/a \quad (2.13)$$

$$\Leftrightarrow \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \hat{x}^2} + \lambda \frac{m}{\hbar^2} a^6 (\hat{x}^2 - 1)^2 \right) |u_i(\hat{x})\rangle = \frac{m}{\hbar^2} a^2 E_i \cdot |u_i(\hat{x})\rangle$$

$$\Leftrightarrow \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \hat{x}^2} + \hat{\lambda} (\hat{x}^2 - 1)^2 \right) |u_i(\hat{x})\rangle = \hat{E}_i \cdot |u_i(\hat{x})\rangle \quad (2.14)$$

Hierbei sind in dem letzten Schritt die dimensionslosen Größen

$$\hat{\lambda} = \lambda \cdot \frac{m}{\hbar^2} a^6 \quad (2.15)$$

$$\hat{E}_i = E_i \cdot \frac{m}{\hbar^2} a^2 \quad (2.16)$$

eingeführt worden.

Damit sehen die entdimensionalisierten Testwellenfunktionen nun wie folgt aus:

$$\begin{aligned} u_0(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3, \hat{x}) &= A_+ \cdot (1 + \alpha_3 \cdot a^2 \hat{x}^2) \cdot \left[\exp\left(-\frac{\alpha_1}{2}(\hat{x}a - \alpha_2)^2\right) + \exp\left(-\frac{\alpha_1}{2}(\hat{x}a + \alpha_2)^2\right) \right] \\ &= A_+ \cdot (1 + \alpha_3 \cdot a^2 \hat{x}^2) \cdot \left[\exp\left(-\frac{a^2 \alpha_1}{2}(\hat{x} - \frac{\alpha_2}{a})^2\right) + \exp\left(-\frac{a^2 \alpha_1}{2}(\hat{x} + \frac{\alpha_2}{a})^2\right) \right] \\ &= A_+ \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \hat{x}^2) \cdot \left[\exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) + \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) \right], \end{aligned} \quad (2.17)$$

mit den neu eingeführten, dimensionslosen Parametern

$$\hat{\alpha}_1 = \alpha_1 \cdot a^2 \quad (2.18)$$

$$\hat{\alpha}_2 = \alpha_2 / a \quad (2.19)$$

$$\hat{\alpha}_3 = \alpha_3 \cdot a^2. \quad (2.20)$$

Analog ergibt sich die Testwellenfunktion des ersten angeregten Zustands

$$u_1(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3, \hat{x}) = A_- \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \hat{x}^2) \cdot \left[\exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) - \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) \right]. \quad (2.21)$$

Da sich die beiden Testwellenfunktionen nur an einer Stelle unterscheiden und dies nur ein Vorzeichen betrifft, bietet es sich an eine Testwellenfunktion aufzustellen, welche diesen Unterschied berücksichtigt

$$u_k(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3, \hat{x}) = A_k \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \hat{x}^2) \cdot \left[\exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) + k \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) \right]. \quad (2.22)$$

Der Fall $k = +1$ bezeichnet den Grundzustand und $k = -1$ den ersten angeregten Zustand.

Damit kann man die folgenden Rechnungen einfach für die obige Testwellenfunktion ausführen und ganz zum Schluss die entsprechenden Werte für k einzusetzen, um sowohl die Energie des Grundzustands als auch die des ersten angeregten Zustands zu erhalten.

2.1 Berechnung der Normierung für $u_k(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3, \hat{x})$

In der Quantenmechanik wird gefordert, dass eine Wellenfunktion normiert ist. Das bedeutet, dass das Integral des Betragsquadrats der Wellenfunktion über den gesamten Raum gleich 1 sein muss.

$$\langle u_k(\hat{x}) | u_k(\hat{x}) \rangle \stackrel{!}{=} 1 \quad (2.23)$$

Die Normierung der Testwellenfunktion aus 2.22 beträgt

$$\langle u_k(\hat{x}) | u_k(\hat{x}) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} A_k^2 \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \hat{x}^2)^2 \left[\exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) + k \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) \right]^2 d\hat{x} \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^{\infty} A_k^2 \cdot (1 + 2\hat{\alpha}_3 \hat{x}^2 + \hat{\alpha}_3^2 \hat{x}^4) \cdot \left[\exp\left(-\hat{\alpha}_1(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) + \exp\left(-\hat{\alpha}_1(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) \right. \\ &\quad \left. + 2 \cdot k \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}[(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2 + (\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2]\right) \right] d\hat{x}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Dieses Integral wird im Folgenden schrittweise für jeden Exponentialterm in der eckigen Klammer einzeln ausgewertet.

Der erste Term ist gegeben durch:

$$N_{k,1}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) := A_k^2 \int_{-\infty}^{\infty} (1 + 2\hat{\alpha}_3 \hat{x}^2 + \hat{\alpha}_3^2 \hat{x}^4) \cdot \exp\left(-\hat{\alpha}_1(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) d\hat{x} \quad (2.26)$$

$$\begin{aligned} &= A_k^2 \int_{-\infty}^{\infty} (1 + 2\hat{\alpha}_3(u + \hat{\alpha}_2)^2 + \hat{\alpha}_3^2(u + \hat{\alpha}_2)^4) \cdot \exp\left(-\hat{\alpha}_1 u^2\right) du \quad \text{mit } u = \hat{x} - \hat{\alpha}_2 \\ &= A_k^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left(1 + 2\hat{\alpha}_3 \cdot (u^2 + 2u \cdot \hat{\alpha}_2 + \hat{\alpha}_2^2) + \hat{\alpha}_3^2 \cdot (u^4 + 4u^3 \cdot \hat{\alpha}_2 \right. \\ &\quad \left. + 6u^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2 + 4u \cdot \hat{\alpha}_2^3 + \hat{\alpha}_2^4)\right) \exp\left(-\hat{\alpha}_1 u^2\right) du \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$= A_k^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left(1 + 2\hat{\alpha}_3 \cdot (u^2 + \hat{\alpha}_2^2) + \hat{\alpha}_3^2 \cdot (u^4 + 6u^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2 + \hat{\alpha}_2^4)\right) \exp\left(-\hat{\alpha}_1 u^2\right) du \quad (2.28)$$

$$\begin{aligned} &= A_k^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left(1 + 2\hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2 + \hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2^4 + u^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 + 6\hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2) + \hat{\alpha}_3^2 \cdot u^4\right) \exp\left(-\hat{\alpha}_1 u^2\right) du \\ &= A_k^2 \sqrt{\pi} \left(\hat{\alpha}_1^{-1/2} (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2)^2 + \hat{\alpha}_1^{-3/2} (\hat{\alpha}_3 + 3\hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2) + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) \end{aligned} \quad (2.29)$$

In dem Schritt von 2.27 nach 2.28 wurden die ungeraden Potenzen von u weggelassen, da diese gemäß 2.11 keinen Beitrag zu dem Integral leisten.

Die Berechnung von

$$N_{k,2}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) := \int_{-\infty}^{\infty} A_k^2 \cdot (1 + 2\hat{\alpha}_3 \hat{x}^2 + \hat{\alpha}_3^2 \hat{x}^4) \cdot \exp\left(-\hat{\alpha}_1(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) d\hat{x} \quad (2.30)$$

verläuft vollkommen analog nur mit dem Unterschied, dass hier die Substitution $v = \hat{x} + \hat{\alpha}_2$ vorgenommen wird. Dies bewirkt, dass die ungeraden Potenzen von v ein negatives Vorzeichen erhalten.

Das ist jedoch irrelevant, da die Integration über die ungeraden Potenzen unabhängig vom Vorzeichen Null ergibt. Somit erhält man für $N_{k,2}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3)$ dasselbe Ergebnis wie für $N_{k,1}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3)$.

$$N_{k,2}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) = A_k^2 \sqrt{\pi} \left(\hat{\alpha}_1^{-1/2} \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2)^2 + \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot (\hat{\alpha}_3 + 3\hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2) + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) \quad (2.31)$$

Es verbleibt die Berechnung des Integrals mit dem gemischten Exponentialfaktor. Ausmultipliziert lautet dieser

$$\exp \left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2} \left[(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2 + (\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2 \right] \right) = \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{x}^2) \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2). \quad (2.32)$$

Somit ergibt sich für den letzten Term

$$N_{k,3}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) := 2 \cdot k \cdot A_k^2 \int_{-\infty}^{\infty} (1 + 2\hat{\alpha}_3 \hat{x}^2 + \hat{\alpha}_3^2 \hat{x}^4) \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{x}^2) \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) d\hat{x} \quad (2.33)$$

$$\begin{aligned} &= 2 \cdot k \cdot A_k^2 \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \int_{-\infty}^{\infty} (1 + 2\hat{\alpha}_3 \hat{x}^2 + \hat{\alpha}_3^2 \hat{x}^4) \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{x}^2) d\hat{x} \\ &= 2 \cdot k \cdot A_k^2 \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \cdot \sqrt{\pi} \cdot \left(\hat{\alpha}_1^{-1/2} + \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot \hat{\alpha}_3 + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) \end{aligned} \quad (2.34)$$

Insgesamt erhält man somit für die Normierung der Wellenfunktion

$$N(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) = N_{k,1}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) + N_{k,2}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) + N_{k,3}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) \quad (2.35)$$

$$\begin{aligned} &= 2A_k^2 \cdot \sqrt{\pi} \cdot \left[\hat{\alpha}_1^{-1/2} \cdot ((1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2)^2 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2)) \right. \\ &\quad + \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot (\hat{\alpha}_3 + 3\hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \cdot \hat{\alpha}_3) \\ &\quad \left. + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \cdot \hat{\alpha}_3^2 \cdot (1 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2)) \right]. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Aus der Normierungsbedingung 2.23 erhält man die Faktoren A_+ beziehungsweise A_- , indem man die entsprechenden Werte für k einsetzt:

$$A_k = \left\{ 2\sqrt{\pi} \cdot \left[\hat{\alpha}_1^{-1/2} \cdot ((1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2)^2 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2)) + \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot (\hat{\alpha}_3 + 3\hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2 \right. \right. \\ \left. \left. + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \cdot \hat{\alpha}_3) + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \cdot \hat{\alpha}_3^2 \cdot (1 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2)) \right] \right\}^{-1/2} \quad (2.37)$$

2.2 Berechnung des potentiellen Anteils der Energie

Gesucht ist ein Ausdruck für den potentiellen Anteil an der Energie, dieser ist gegeben durch

$$\langle u_k(\hat{x}) | \hat{\lambda}(\hat{x}^2 - 1)^2 | u_k(\hat{x}) \rangle \quad (2.38)$$

Hierfür wird zunächst der im Integral auftretende Faktor $(\hat{x}^2 - 1)^2 \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \hat{x}^2)^2$ berechnet und nach Potenzen von \hat{x} sortiert. Es ergibt sich:

$$\begin{aligned} (\hat{x}^2 - 1)^2 \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \hat{x}^2)^2 &= (\hat{x}^4 - 2\hat{x}^2 + 1) \cdot (1 + 2\hat{\alpha}_3 \hat{x}^2 + \hat{\alpha}_3^2 \hat{x}^4) \\ &= 1 + \hat{x}^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2) + \hat{x}^4 \cdot (1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) + \hat{x}^6 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + \hat{x}^8 \cdot \hat{\alpha}_3^2. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Damit beträgt der potentielle Anteil an der Energie

$$\begin{aligned} \langle u_k(\hat{x}) | \hat{\lambda}(\hat{x}^2 - 1)^2 | u_k(\hat{x}) \rangle &= A_k^2 \cdot \hat{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} \left(1 + \hat{x}^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2) + \hat{x}^4 \cdot (1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) \right. \\ &\quad \left. + \hat{x}^6 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + \hat{x}^8 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) \cdot \left[\exp(-\hat{\alpha}_1(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2) \right. \\ &\quad \left. + \exp(-\hat{\alpha}_1(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2) + 2k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1(\hat{x}^2 + \hat{\alpha}_2^2)) \right] d\hat{x}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Auch hier soll das Integral wieder schrittweise für die drei Exponentialterme ausgewertet werden. Der erste Term beträgt:

$$\begin{aligned} P_{k,1}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) &:= A_k^2 \cdot \hat{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} \left[1 + \hat{x}^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2) + \hat{x}^4 \cdot (1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) \right. \\ &\quad \left. + \hat{x}^6 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + \hat{x}^8 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right] \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2) d\hat{x} \end{aligned} \quad (2.41)$$

$$\begin{aligned} &= A_k^2 \cdot \hat{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} \left[1 + (u + \hat{\alpha}_2)^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2) + (u + \hat{\alpha}_2)^4 \cdot (1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) \right. \\ &\quad \left. + (u + \hat{\alpha}_2)^6 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + (u + \hat{\alpha}_2)^8 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right] \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 u^2) du \end{aligned} \quad (2.42)$$

$$\begin{aligned} &= A_k^2 \cdot \hat{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} \left[1 + (u^2 + \hat{\alpha}_2^2) \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2) + (u^4 + 6u^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2 + \hat{\alpha}_2^4) \cdot (1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) \right. \\ &\quad \left. + (u^6 + 15u^2 \cdot \hat{\alpha}_2^4 + 15u^4 \cdot \hat{\alpha}_2^2 + \hat{\alpha}_2^6) \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) \right. \\ &\quad \left. + (u^8 + 28u^2 \cdot \hat{\alpha}_2^6 + 70u^4 \cdot \hat{\alpha}_2^4 + 28u^6 \cdot \hat{\alpha}_2^2 + \hat{\alpha}_2^8) \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right] \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 u^2) du \end{aligned} \quad (2.43)$$

$$\begin{aligned} &= A_k^2 \cdot \hat{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\left(1 + \hat{\alpha}_2^2(2\hat{\alpha}_3 - 2) + \hat{\alpha}_2^4(1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) + \hat{\alpha}_2^6(2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + \hat{\alpha}_2^8 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) \right. \\ &\quad \left. + u^2 \cdot \left((2\hat{\alpha}_3 - 2) + 6\hat{\alpha}_2^2 \cdot (1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) + 15\hat{\alpha}_2^4 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + 28\hat{\alpha}_2^6 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) \right. \\ &\quad \left. + u^4 \cdot \left((1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) + 15\hat{\alpha}_2^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + 70\hat{\alpha}_2^4 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) \right. \\ &\quad \left. + u^6 \cdot \left((2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + 28\hat{\alpha}_2^2 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) + u^8 \hat{\alpha}_3^2 \right] \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 u^2) du \end{aligned} \quad (2.44)$$

$$\begin{aligned}
&= A_k^2 \cdot \hat{\lambda} \cdot \sqrt{\pi} \left[\hat{\alpha}_1^{-1/2} \cdot \left(1 + \hat{\alpha}_2^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2) + \hat{\alpha}_2^4 \cdot (1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) + \hat{\alpha}_2^6 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) \right. \right. \\
&\quad + \hat{\alpha}_2^8 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \Big) + \frac{1}{2} \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot \left((2\hat{\alpha}_3 - 2) + 6\hat{\alpha}_2^2 \cdot (1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) + 15\hat{\alpha}_2^4 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) \right. \\
&\quad + 28\hat{\alpha}_2^6 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \Big) + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \left((1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) + 15\hat{\alpha}_2^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + 70\hat{\alpha}_2^4 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) \\
&\quad \left. \left. + \frac{15}{8} \hat{\alpha}_1^{-7/2} \cdot \left((2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + 28\hat{\alpha}_2^2 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) + \frac{105}{16} \hat{\alpha}_1^{-9/2} \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right] \right] \quad (2.45)
\end{aligned}$$

In 2.43 wurde auf die Angabe der ungeraden Potenzen von u verzichtet, da diese keinen Beitrag zu dem Integral ergeben.

Die Berechnung des zweiten Faktors $P_{k,2}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) := A_k^2 \cdot \hat{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} [\dots] \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2) d\hat{x}$ liefert dasselbe Ergebnis wie $P_{k,1}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3)$, weil sich das Vorzeichen wieder nur für die ungeraden Potenzen von $v = \hat{x} + \hat{\alpha}_2$ ändert und diese wie bereits erwähnt nicht zum Integral beitragen.

$$\begin{aligned}
P_{k,2}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) &= A_k^2 \cdot \hat{\lambda} \cdot \sqrt{\pi} \left[\hat{\alpha}_1^{-1/2} \cdot \left(1 + \hat{\alpha}_2^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2) + \hat{\alpha}_2^4 \cdot (1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) + \hat{\alpha}_2^6 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) \right. \right. \\
&\quad + \hat{\alpha}_2^8 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \Big) + \frac{1}{2} \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot \left((2\hat{\alpha}_3 - 2) + 6\hat{\alpha}_2^2 \cdot (1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) + 15\hat{\alpha}_2^4 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) \right. \\
&\quad + 28\hat{\alpha}_2^6 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \Big) + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \left((1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) + 15\hat{\alpha}_2^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + 70\hat{\alpha}_2^4 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) \\
&\quad \left. \left. + \frac{15}{8} \hat{\alpha}_1^{-7/2} \cdot \left((2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + 28\hat{\alpha}_2^2 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) + \frac{105}{16} \hat{\alpha}_1^{-9/2} \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right] \right] \quad (2.46)
\end{aligned}$$

Zuletzt wird das Integral über den gemischten Exponentialterm berechnet:

$$\begin{aligned}
P_{k,3}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) &:= 2k \cdot A_k^2 \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \cdot \hat{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} \left[1 + \hat{x}^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2) + \hat{x}^4 \cdot (1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) \right. \\
&\quad \left. + \hat{x}^6 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + \hat{x}^8 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right] \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{x}^2) d\hat{x} \quad (2.47)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= 2k \cdot A_k^2 \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \cdot \sqrt{\pi} \cdot \hat{\lambda} \cdot \left[\hat{\alpha}_1^{-1/2} + \frac{1}{2} \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2) \right. \\
&\quad \left. + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \cdot (1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) + \frac{15}{8} \hat{\alpha}_1^{-7/2} \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + \frac{105}{16} \hat{\alpha}_1^{-9/2} \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right] \quad (2.48)
\end{aligned}$$

Insgesamt ergibt sich somit für den potentiellen Anteil an der Energie:

$$P(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) := P_{k,1}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) + P_{k,2}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) + P_{k,3}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) \quad (2.49)$$

$$\begin{aligned}
&= 2A_k^2 \cdot \hat{\lambda} \cdot \sqrt{\pi} \left\{ \hat{\alpha}_1^{-1/2} \cdot \left[1 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) + \hat{\alpha}_2^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2) + \hat{\alpha}_2^4 \cdot (1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) \right. \right. \\
&\quad + \hat{\alpha}_2^6 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + \hat{\alpha}_2^8 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \Big] + \frac{1}{2} \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot \left[\left(1 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \right) (2\hat{\alpha}_3 - 2) \right. \\
&\quad + 6\hat{\alpha}_2^2 \cdot (1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) + 15\hat{\alpha}_2^4 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + 28\hat{\alpha}_2^6 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \Big] \\
&\quad + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \left[\left(1 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \right) (1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) + 15\hat{\alpha}_2^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + 70\hat{\alpha}_2^4 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right] \\
&\quad + \frac{15}{8} \hat{\alpha}_1^{-7/2} \cdot \left[\left(1 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \right) (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + 28\hat{\alpha}_2^2 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right] \\
&\quad \left. \left. + \frac{105}{16} \hat{\alpha}_1^{-9/2} \cdot \hat{\alpha}_3^2 \cdot \left[1 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \right] \right\} \right] \quad (2.50)
\end{aligned}$$

2.3 Berechnung des kinetischen Anteils der Energie

In diesem Abschnitt soll zuerst die zweite Ableitung der Wellenfunktion berechnet werden, bevor die eigentliche Berechnung des kinetischen Anteils an der Energie erfolgt.

$$\frac{d^2}{d\hat{x}^2} \left\{ (1 + \hat{\alpha}_3 \hat{x}^2) \cdot \left[\exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) + k \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) \right] \right\} \quad (2.51)$$

$$= \frac{d}{d\hat{x}} \left\{ 2\hat{\alpha}_3 \cdot \hat{x} \left[\exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) + k \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) \right] + (1 + \hat{\alpha}_3 \hat{x}^2) \times \left[-\hat{\alpha}_1 \cdot (\hat{x} - \hat{\alpha}_2) \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) - \hat{\alpha}_1 \cdot (\hat{x} + \hat{\alpha}_2) \cdot k \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) \right] \right\} \quad (2.52)$$

$$= \left\{ 2\hat{\alpha}_3 \left[\exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) + k \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) \right] - 4\hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3 \cdot x \left[(\hat{x} - \hat{\alpha}_2) \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) + (\hat{x} + \hat{\alpha}_2) \cdot k \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) \right] + (1 + \hat{\alpha}_3 \hat{x}^2) \cdot \left[(\hat{\alpha}_1^2 \cdot (\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2 - \hat{\alpha}_1) \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) + (\hat{\alpha}_1^2 \cdot (\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2 - \hat{\alpha}_1) \cdot k \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) \right] \right\} \quad (2.53)$$

Damit kann man nun den kinetischen Anteil an der Energie berechnen, dieser beträgt:

$$\begin{aligned} \langle u_k(\hat{x}) | -\frac{1}{2}\Delta | u_k(\hat{x}) \rangle &= -\frac{A_k^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (1 + \hat{\alpha}_3 \hat{x}^2) \cdot \left[\exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) + k \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) \right] \\ &\quad \times \left\{ 2\hat{\alpha}_3 \left[\exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) + k \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) \right] - 4\hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3 \cdot x \left[(\hat{x} - \hat{\alpha}_2) \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (\hat{x} + \hat{\alpha}_2) \cdot k \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) \right] + (1 + \hat{\alpha}_3 \hat{x}^2) \cdot \left[(\hat{\alpha}_1^2 \cdot (\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2 - \hat{\alpha}_1) \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (\hat{\alpha}_1^2 \cdot (\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2 - \hat{\alpha}_1) \cdot k \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) \right] \right\} d\hat{x} \end{aligned} \quad (2.54)$$

Auch hier soll die Berechnung des Integrals wieder schrittweise erfolgen. Dies wird in 3 Schritten entsprechend den 3 Termen in der geschweiften Klammer geschehen.

Der erste dieser drei Terme ist:

$$K_{k,1}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) := \int_{-\infty}^{\infty} (1 + \hat{\alpha}_3 \hat{x}^2) \cdot \left[\exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) + k \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) \right] \\ \times 2\hat{\alpha}_3 \left[\exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) + k \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) \right] d\hat{x} \quad (2.55)$$

$$= 2\hat{\alpha}_3 \int_{-\infty}^{\infty} (1 + \hat{\alpha}_3(u + \hat{\alpha}_2)^2) \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 u^2) du \\ + 2\hat{\alpha}_3 \int_{-\infty}^{\infty} k^2 \cdot (1 + \hat{\alpha}_3(v - \hat{\alpha}_2)^2) \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 v^2) dv \\ + 4\hat{\alpha}_3 \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \int_{-\infty}^{\infty} k \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \hat{x}^2) \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{x}^2) d\hat{x} \quad (2.56)$$

$$= 4\hat{\alpha}_3 \int_{-\infty}^{\infty} (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2 + \hat{\alpha}_3 \cdot u^2) \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 u^2) du \\ + 4k \cdot \hat{\alpha}_3 \cdot \sqrt{\pi} \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \left[\hat{\alpha}_1^{-1/2} + \frac{1}{2} \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot \hat{\alpha}_3 \right] \quad (2.57)$$

$$= 4\hat{\alpha}_3 \cdot \sqrt{\pi} \left[\hat{\alpha}_1^{-1/2} \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2)) \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot \hat{\alpha}_3 \cdot (1 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2)) \right] \quad (2.58)$$

In dem Schritt von 2.56 nach 2.57 wurden zunächst die ungeraden Potenzen von u und v weggelassen und zusätzlich wurde das v ebenfalls in ein u umbenannt, weil dann beide Integrale die identische Form haben.

Das Integral über den ausmultiplizierten zweiten Term der geschweiften Klammer ergibt:

$$K_{k,2}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) := \int_{-\infty}^{\infty} 4\hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{x} \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \hat{x}^2) \cdot \left[(\hat{x} - \hat{\alpha}_2) \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2) \right. \\ \left. + (\hat{x} + \hat{\alpha}_2) \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2) \right. \\ \left. + 2k \cdot \hat{x} \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{x}^2) \right] d\hat{x} \quad (2.59)$$

$$= 4\hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3 \left[\int_{-\infty}^{\infty} (u + \hat{\alpha}_2) \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot (u + \hat{\alpha}_2)^2) \cdot u \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 u^2) du \right. \\ \left. + \int_{-\infty}^{\infty} (v - \hat{\alpha}_2) \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot (v - \hat{\alpha}_2)^2) \cdot v \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 v^2) dv \right. \\ \left. + 2k \int_{-\infty}^{\infty} \hat{x}^2 \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \hat{x}^2) \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{x}^2) d\hat{x} \right] \quad (2.60)$$

$$\begin{aligned}
&= 4\hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3 \left[\int_{-\infty}^{\infty} \left(u + \hat{\alpha}_2 + u^2 \hat{\alpha}_2 \cdot \hat{\alpha}_3 + 2u\hat{\alpha}_2^2 \cdot \hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^3 + u^3 \hat{\alpha}_3 + 2u^2 \hat{\alpha}_2 \cdot \hat{\alpha}_3 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + u \cdot \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2 \right) \cdot u \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 u^2) du + \int_{-\infty}^{\infty} \left(v - \hat{\alpha}_2 - v^2 \hat{\alpha}_2 \cdot \hat{\alpha}_3 + 2v\hat{\alpha}_2^2 \cdot \hat{\alpha}_3 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^3 + v^3 \hat{\alpha}_3 - 2v^2 \hat{\alpha}_2 \cdot \hat{\alpha}_3 + v \cdot \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2 \right) \cdot v \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 v^2) dv \right. \\
&\quad \left. + 2k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{x}^2 + \hat{\alpha}_3 \hat{x}^4) \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{x}^2) d\hat{x} \right] \tag{2.61}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= 4\hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3 \left[\int_{-\infty}^{\infty} 2 \left(u^2 (1 + 3\hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2) + u^4 \hat{\alpha}_3 \right) \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 u^2) du \right. \\
&\quad \left. + 2k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \cdot \sqrt{\pi} \left(\frac{1}{2} \hat{\alpha}_1^{-3/2} + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_1^{-5/2} \right) \right] \tag{2.62}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= 8\hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3 \sqrt{\pi} \left[\frac{1}{2} \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot \left(1 + 3\hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \cdot \hat{\alpha}_3 \left(1 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \right) \right] \tag{2.63}
\end{aligned}$$

Es verbleibt die Berechnung des letztens Terms der geschweiften Klammer:

$$\begin{aligned}
K_{k,3}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) &:= \int_{-\infty}^{\infty} (1 + \hat{\alpha}_3 \hat{x}^2)^2 \cdot \left[\exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) + k \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) \right] \\
&\quad \times \left[\left(\hat{\alpha}_1^2 \cdot (\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2 - \hat{\alpha}_1 \right) \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} - \hat{\alpha}_2)^2\right) \right. \\
&\quad \left. + \left(\hat{\alpha}_1^2 \cdot (\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2 - \hat{\alpha}_1 \right) \cdot k \cdot \exp\left(-\frac{\hat{\alpha}_1}{2}(\hat{x} + \hat{\alpha}_2)^2\right) \right] d\hat{x} \tag{2.64}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{-\infty}^{\infty} (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot (u + \hat{\alpha}_2)^2)^2 \cdot (\hat{\alpha}_1^2 \cdot u^2 - \hat{\alpha}_1) \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 u^2) du \\
&\quad + \int_{-\infty}^{\infty} (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot (v - \hat{\alpha}_2)^2)^2 \cdot (\hat{\alpha}_1^2 \cdot v^2 - \hat{\alpha}_1) \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 v^2) dv \\
&\quad + 2k \int_{-\infty}^{\infty} (1 + \hat{\alpha}_3 \hat{x}^2)^2 \cdot (\hat{\alpha}_1^2 \cdot \hat{x}^2 + \hat{\alpha}_1^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2 - \hat{\alpha}_1) \exp(-\hat{\alpha}_1(\hat{x}^2 + \hat{\alpha}_2^2)) d\hat{x} \tag{2.65}
\end{aligned}$$

Im Folgenden werden die Polynome ausmultipliziert und nach den jeweiligen Potenzen zusammengefasst, bevor die Integrale ausgewertet werden. Die Ausmultiplikation wird unter einem Integral über symmetrische Grenzen ausgeführt, da sonst die ungeraden Potenzen nicht weggelassen werden können, weil das Gleichheitszeichen dann nicht mehr gilt.

$$f_1(u) := \int_{-\infty}^{\infty} (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot (u + \hat{\alpha}_2)^2)^2 \cdot (\hat{\alpha}_1^2 \cdot u^2 - \hat{\alpha}_1) du \tag{2.66}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot (u^2 + 2u \cdot \hat{\alpha}_2 + \hat{\alpha}_2^2))^2 \cdot (\hat{\alpha}_1^2 \cdot u^2 - \hat{\alpha}_1) du \tag{2.67}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left(1 + 2\hat{\alpha}_3 \cdot (u^2 + 2u \cdot \hat{\alpha}_2 + \hat{\alpha}_2^2) + \hat{\alpha}_3^2 \cdot (u^2 + 2u \cdot \hat{\alpha}_2 + \hat{\alpha}_2^2)^2 \right) \cdot (\hat{\alpha}_1^2 \cdot u^2 - \hat{\alpha}_1) \, du \quad (2.68)$$

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(1 + 2\hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2 + \hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2^4 + u \cdot (4\hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2 + 4\hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2^3) + u^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 + 6\hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2) \right. \\ &\quad \left. + 4u^3 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2 + u^4 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) \cdot (\hat{\alpha}_1^2 \cdot u^2 - \hat{\alpha}_1) \, du \end{aligned} \quad (2.69)$$

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[-\hat{\alpha}_1 \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2)^2 + u^2 \cdot \left(\hat{\alpha}_1^2 \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2)^2 - \hat{\alpha}_1 \cdot (2\hat{\alpha}_3 + 6\hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2) \right) \right. \\ &\quad \left. + u^4 \cdot \left(\hat{\alpha}_1^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 + 6\hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2) - \hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) + u^6 \hat{\alpha}_1^2 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right] \, du \end{aligned} \quad (2.70)$$

In dem Schritt von 2.69 nach 2.70 wurden alle ungeraden Potenzen von u weggelassen, da diese keinen Beitrag zu dem Integral leisten. Man erhält dasselbe Ergebnis für das Polynom welches von v abhängt, da sich das Vorzeichen nur bei den ungeraden Potenzen ändert.

Das dritte Polynom beträgt:

$$f_2(\hat{x}) := \int_{-\infty}^{\infty} (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{x}^2)^2 \cdot \left(2\hat{\alpha}_1^2 \cdot \hat{x}^2 - 2\hat{\alpha}_1 + 2\hat{\alpha}_1^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2 \right) \, d\hat{x} \quad (2.71)$$

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^{\infty} 2\hat{\alpha}_1^2 \cdot \left(\hat{x}^2 + 2\hat{\alpha}_3 \cdot \hat{x}^4 + \hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{x}^6 + \hat{\alpha}_2^2 + 2\hat{\alpha}_2^2 \cdot \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{x}^2 + \hat{\alpha}_2^2 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{x}^4 \right) \\ &\quad - 2\hat{\alpha}_1 - 4\hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{x}^2 - 2\hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{x}^4 \, d\hat{x} \end{aligned} \quad (2.72)$$

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^{\infty} 2\hat{\alpha}_1^2 \cdot \left(\hat{\alpha}_2^2 + (1 + 2\hat{\alpha}_2^2 \cdot \hat{\alpha}_3) \cdot \hat{x}^2 + (2\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_2^2 \cdot \hat{\alpha}_3^2) \cdot \hat{x}^4 + \hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{x}^6 \right) \\ &\quad - 2\hat{\alpha}_1 - 4\hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{x}^2 - 2\hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{x}^4 \, d\hat{x} \end{aligned} \quad (2.73)$$

Damit kann man die Integrale aus 2.65 einfach berechnen:

$$\begin{aligned} K_{k,3}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) &= \int_{-\infty}^{\infty} 2 \left[-\hat{\alpha}_1 \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2)^2 + u^2 \cdot \left(\hat{\alpha}_1^2 \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2)^2 - \hat{\alpha}_1 \cdot (2\hat{\alpha}_3 + 6\hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2) \right) \right. \\ &\quad \left. + u^4 \cdot \left(\hat{\alpha}_1^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 + 6\hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2) - \hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) + u^6 \hat{\alpha}_1^2 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right] \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 u^2) \, du \\ &\quad + k \int_{-\infty}^{\infty} \left[2\hat{\alpha}_1^2 \cdot \left(\hat{\alpha}_2^2 + (1 + 2\hat{\alpha}_2^2 \cdot \hat{\alpha}_3) \cdot \hat{x}^2 + (2\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_2^2 \cdot \hat{\alpha}_3^2) \cdot \hat{x}^4 + \hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{x}^6 \right) \right. \\ &\quad \left. - 2\hat{\alpha}_1 - 4\hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{x}^2 - 2\hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{x}^4 \right] \exp(-\hat{\alpha}_1(\hat{x}^2 + \hat{\alpha}_2)^2) \, d\hat{x} \end{aligned} \quad (2.74)$$

$$\begin{aligned}
&= 2\sqrt{\pi} \left[-\hat{\alpha}_1^{-1/2} \cdot \hat{\alpha}_1 \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2)^2 + \frac{1}{2} \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot (\hat{\alpha}_1^2 \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2)^2 \right. \\
&\quad \left. - \hat{\alpha}_1 \cdot (2\hat{\alpha}_3 + 6\hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2) \right) + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \cdot (\hat{\alpha}_1^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 + 6\hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2) - \hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3^2) \\
&\quad + \frac{15}{8} \hat{\alpha}_1^{-7/2} \cdot \hat{\alpha}_1^2 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \Big] \\
&\quad + \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \cdot \sqrt{\pi} \cdot k \cdot \left[2\hat{\alpha}_1^2 \cdot \left(\hat{\alpha}_1^{-1/2} \cdot \hat{\alpha}_2^2 + \frac{1}{2} \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot (1 + 2\hat{\alpha}_2^2 \cdot \hat{\alpha}_3) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \cdot (2\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_2^2 \cdot \hat{\alpha}_3^2) + \frac{15}{8} \hat{\alpha}_1^{-7/2} \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) \right. \\
&\quad \left. - \hat{\alpha}_1 \cdot \left(2\hat{\alpha}_1^{-1/2} + 2\hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_1^{-3/2} + \frac{3}{2} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) \right] \tag{2.75}
\end{aligned}$$

Demnach beträgt der gesamte Anteil an der kinetischen Energie

$$\begin{aligned}
K(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) &:= -\frac{1}{2} A_k^2 \left(K_{k,1}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) - K_{k,2}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) + K_{k,3}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) \right) \tag{2.76} \\
&= -\frac{1}{2} A_k^2 \cdot \sqrt{\pi} \cdot \left\{ 4\hat{\alpha}_3 \left[\hat{\alpha}_1^{-1/2} \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2) + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot \hat{\alpha}_3 \cdot (1 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2)) \right] \\
&\quad - 8\hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3 \left[\frac{1}{2} \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot (1 + 3\hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2) + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \right) \\
&\quad + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \cdot \hat{\alpha}_3 \left(1 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \right) \Big] \\
&\quad + 2 \left[-\hat{\alpha}_1^{-1/2} \cdot \hat{\alpha}_1 \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2)^2 + \frac{1}{2} \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot (\hat{\alpha}_1^2 \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2)^2 \right. \\
&\quad \left. - \hat{\alpha}_1 \cdot (2\hat{\alpha}_3 + 6\hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2) \right) + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \cdot (\hat{\alpha}_1^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 + 6\hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2) - \hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3^2) \\
&\quad + \frac{15}{8} \hat{\alpha}_1^{-7/2} \cdot \hat{\alpha}_1^2 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \Big] \\
&\quad + \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \cdot k \cdot \left[2\hat{\alpha}_1^2 \cdot \left(\hat{\alpha}_1^{-1/2} \cdot \hat{\alpha}_2^2 + \frac{1}{2} \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot (1 + 2\hat{\alpha}_2^2 \cdot \hat{\alpha}_3) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \cdot (2\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_2^2 \cdot \hat{\alpha}_3^2) + \frac{15}{8} \hat{\alpha}_1^{-7/2} \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) \right. \\
&\quad \left. - \hat{\alpha}_1 \cdot \left(2\hat{\alpha}_1^{-1/2} + 2\hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_1^{-3/2} + \frac{3}{2} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) \right] \Big\}. \tag{2.77}
\end{aligned}$$

Schlussendlich kann man einen geschlossenen Ausdruck für die beiden Energien angeben:

$$\hat{E}_k(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) := \left(P(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) + K(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) \right) / N(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) \quad (2.78)$$

$$\begin{aligned}
&= \left[\left\{ 2 \cdot \hat{\lambda} \cdot \sqrt{\pi} \left[\hat{\alpha}_1^{-1/2} \cdot \left(1 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) + \hat{\alpha}_2^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2) + \hat{\alpha}_2^4 \cdot (1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) \right. \right. \right. \right. \\
&\quad + \hat{\alpha}_2^6 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + \hat{\alpha}_2^8 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \left. \left. \left. \left. \right) + \frac{1}{2} \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot \left((1 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2)) (2\hat{\alpha}_3 - 2) \right. \right. \right. \\
&\quad + 6\hat{\alpha}_2^2 \cdot (1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) + 15\hat{\alpha}_2^4 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + 28\hat{\alpha}_2^6 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \left. \left. \left. \right) \right. \right. \\
&\quad + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \left((1 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2)) (1 - 4\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3^2) + 15\hat{\alpha}_2^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + 70\hat{\alpha}_2^4 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) \\
&\quad + \frac{15}{8} \hat{\alpha}_1^{-7/2} \cdot \left((1 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2)) (2\hat{\alpha}_3 - 2\hat{\alpha}_3^2) + 28\hat{\alpha}_2^2 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) \\
&\quad \left. \left. \left. \left. + \frac{105}{16} \hat{\alpha}_1^{-9/2} \cdot \hat{\alpha}_3^2 \cdot (1 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2)) \right] \right\} \right. \\
&- \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \cdot \left\{ 4\hat{\alpha}_3 \left[\hat{\alpha}_1^{-1/2} \cdot \left(1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \right) \right. \right. \\
&\quad + \frac{1}{2} \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot \hat{\alpha}_3 \cdot (1 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2)) \left. \right. \\
&\quad - 8\hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3 \left[\frac{1}{2} \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot \left(1 + 3\hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \right) \right. \\
&\quad + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \cdot \hat{\alpha}_3 \left(1 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \right) \left. \right. \\
&\quad + 2 \left[-\hat{\alpha}_1^{-1/2} \cdot \hat{\alpha}_1 \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2)^2 + \frac{1}{2} \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot (\hat{\alpha}_1^2 \cdot (1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2)^2 \right. \\
&\quad - \hat{\alpha}_1 \cdot (2\hat{\alpha}_3 + 6\hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2) \left. \right) + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \cdot (\hat{\alpha}_1^2 \cdot (2\hat{\alpha}_3 + 6\hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2) - \hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_3^2) \\
&\quad + \frac{15}{8} \hat{\alpha}_1^{-7/2} \cdot \hat{\alpha}_1^2 \cdot \hat{\alpha}_3^2 \left. \right. \\
&\quad + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \cdot \left(2\hat{\alpha}_1^2 \cdot \left(\hat{\alpha}_1^{-1/2} \cdot \hat{\alpha}_2^2 + \frac{1}{2} \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot (1 + 2\hat{\alpha}_2^2 \cdot \hat{\alpha}_3) \right. \right. \\
&\quad + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \cdot (2\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_2^2 \cdot \hat{\alpha}_3^2) + \frac{15}{8} \hat{\alpha}_1^{-7/2} \cdot \hat{\alpha}_3^2 \left. \right. \\
&\quad - \hat{\alpha}_1 \cdot \left(2\hat{\alpha}_1^{-1/2} + 2\hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_1^{-3/2} + \frac{3}{2} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \cdot \hat{\alpha}_3^2 \right) \left. \right) \left. \right\} \\
&\times \left\{ 2\sqrt{\pi} \cdot \left[\hat{\alpha}_1^{-1/2} \cdot \left(1 + \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_2^2 \right)^2 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \right) + \hat{\alpha}_1^{-3/2} \cdot \left(\hat{\alpha}_3 + 3\hat{\alpha}_3^2 \cdot \hat{\alpha}_2^2 \right. \right. \\
&\quad + k \cdot \hat{\alpha}_3 \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2) \left. \right) + \frac{3}{4} \hat{\alpha}_1^{-5/2} \cdot \hat{\alpha}_3^2 \cdot (1 + k \cdot \exp(-\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2^2)) \left. \right] \left. \right\}^{-1} \quad (2.79)
\end{aligned}$$

Für den Grundzustand ist $k = +1$ zu setzen, für den ersten angeregten Zustands $k = -1$.

2.4 Minimierung der Energie

Nachdem Ausdrücke für die Grundzustandsenergie und den ersten angeregten Zustand gefunden wurden, müssen diese nun bezüglich der drei Parameter $\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2$ und $\hat{\alpha}_3$ für verschiedene Werte von $\hat{\lambda}$ minimiert werden. Diese Minimierung geschieht numerisch mit Hilfe des Programms *Mathematica 10.1* und dessen intrinsischer, numerischer Minimierungsfunktion *NMinimize*[...]. Die Einschränkungen an die Funktion wurden je nach dem Wert von $\hat{\lambda}$ gewählt, da es sich herausstellte, dass die Minimierung empfindlich auf diese reagiert. So gibt zum Beispiel die Einschränkung $\hat{\alpha}_1 > 0$ ein leicht anderes Ergebnis als $\hat{\alpha}_1 > 0$ zusammen mit $\hat{\alpha}_2 < 2$. Weiterhin wurde zum Vergleich jeder Wert zusätzlich noch mit den Methoden *FindMinimum*[...] und *Minimize*[...] minimiert. Die Funktion *FindMinimum*[...] ist für die Suche von lokalen Minima vorgesehen und es müssen geeignete Annahmen für die Parameter getroffen werden, um korrekte Ergebnisse zu erhalten. Die Methode *Minimize*[...] kann laut der Dokumentation von *Mathematica* exakte globale Minima finden, was hier aber oft keine guten Ergebnisse brachte. Generell zeigte sich, dass die Methode *FindMinimum*[...] häufig einen guten Richtwert für die Energie ausgab, diese sich jedoch mit *NMinimize*[...] noch ein wenig verbessern ließ. Um eine ausreichende Genauigkeit der Ergebnisse zu erreichen, wurde in die Minimierungsmethoden noch die Option *PrecisionGoal* → 120 eingebracht. Dies bewirkt, dass *Mathematica* versucht, dass der numerische Fehler der Rechnungen kleiner als $|x|10^{-120}$ ist, wobei $|x|$ das Ergebnis der Rechnung bezeichnet.

Hier wurde die Minimierung beispielhaft für 6 verschiedene Werte von $\hat{\lambda}$ durchgeführt:

$\hat{\lambda}$	\hat{E}_0	$\hat{\alpha}_1$	$\hat{\alpha}_2$	$\hat{\alpha}_3$
0.01	0.1257849	0.5163896	1.1971926	-0.0391601
0.1	0.2696879	1.0593733	0.9180729	-0.0819280
1	0.8727110	2.1006092	0.8324339	-0.1617510
10	4.1835178	6.0143942	1.0089647	-0.2838311
100	13.905883547	23.3887554	1.03493329629	-0.41946874065
1000	44.4833977860150714 90936243306010184	78.8340145735767464 7162989820766205	1.02391167560636483 302292168164740834	-0.55345199459838049 37268695930058533

Tabelle 1: Die minimierte Grundzustandsenergie und die dazugehörigen Werte der drei Parameter für 6 verschiedene Werte von $\hat{\lambda}$.

$\hat{\lambda}$	\hat{E}_1	$\hat{\alpha}_1$	$\hat{\alpha}_2$	$\hat{\alpha}_3$
0.01	0.4570470	0.8456390	1.2927464	0.0938978
0.1	0.8770702	1.3953367	1.3072520	-0.0758179
1	1.6631533	2.8993889	1.0558498	-0.1540574
10	4.2610610	6.7901667	1.0187037	-0.2801489
100	13.9058835648	23.3888089	1.03493329115	-0.41946872696
1000	44.4833977860150714 90936243306010216	78.8340145735767464 7162989820767443	1.02391167560636483 302292168164741003	-0.55345199459838049 37268695930057625

Tabelle 2: Die minimierte Energie des ersten angeregten Zustands und die dazugehörigen Werte der drei Parameter für 6 verschiedene Werte von $\hat{\lambda}$.

Man erkennt an den Werten in den beiden Tabellen, dass je größer der Wert von $\hat{\lambda}$ ist, desto näher liegen die beiden Energien zusammen und die drei Parameter der beiden Wellenfunktionen sind auf viele Nachkommastellen hin identisch.

In der groben Näherung, dass für geringe Auslenkungen die Mulden des Potentials durch das Potential eines harmonischen Oszillators beschrieben werden können, sollte der Parameter $\hat{\alpha}_1$ den Wert $\sqrt{8\hat{\lambda}}$ annehmen. Dies folgt daraus, dass in der entdimensionalisierten Form der Hamiltonoperator des Oszillators gegeben ist durch $H_{HO}(x) = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\frac{m^2w^2}{\hbar^2}x^2$.

Der Faktor $\frac{mw}{\hbar}$ findet sich im Exponenten der Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators wieder

$$\phi_n(x) \sim \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{mw}{\hbar} x^2\right) \quad (2.80)$$

und somit sollte im Idealfall $\hat{\alpha}_1$ den Wert $\frac{mw}{\hbar}$ annehmen. Aus der Forderung $mw^2 = V''(x)|_{x=a}$ beziehungsweise in der entdimensionalisierten Form $\frac{m^2 w^2}{\hbar^2} = V''(\hat{x})|_{\hat{x}=1}$ folgert man $\hat{\alpha}_1 = \frac{mw}{\hbar} = \sqrt{8\hat{\lambda}}$.

Wie in der unten stehenden Tabelle zu sehen ist, weichen beide Werte von $\hat{\alpha}_1$ jedoch davon ab.

$\hat{\lambda}$	0.01	0.1	1	10	100	1000
$\sqrt{8\hat{\lambda}}$	0.2828427	0.8944272	2.8284271	8.9442719	28.2842712	89.4427191
$\hat{\alpha}_1$ für \hat{E}_0	0.5163896	1.0593733	2.1006092	6.0143942	23.3887554	78.8340145...
$\hat{\alpha}_1$ für \hat{E}_1	0.8456390	1.3953367	2.8993889	6.7901667	23.3888089	78.8340145...

Tabelle 3: Vergleich der Werte von $\hat{\alpha}_1$ des Grundzustands und des ersten angeregten Zustands mit $\sqrt{8\hat{\lambda}}$ für verschiedene Werte von $\hat{\lambda}$.

Der Parameter $\hat{\alpha}_3$ nimmt für größere Werte von $\hat{\lambda}$ immer eine kleinere, negative Zahl an und $\hat{\alpha}_2$ liegt immer in der Nähe von 1, was der simplen Vorstellung entspricht, dass die Wellenfunktion bei $\pm a$ am stärksten lokalisiert ist.

Um ein Bild davon zu bekommen wie die Energien von den Parametern abhängen, wurden entsprechende Grafiken hierfür erstellt. In den unten stehenden Abbildungen sind beispielhaft farbcodierte 3D-Plots der Grundzustandsenergie \hat{E}_0 und des ersten angeregten Zustands \hat{E}_1 jeweils um das Minimum herum für $\hat{\lambda} = 1$ dargestellt. Aufgetragen wurden diese Energien bei dem entsprechendem optimalen Wert von $\hat{\alpha}_2$.

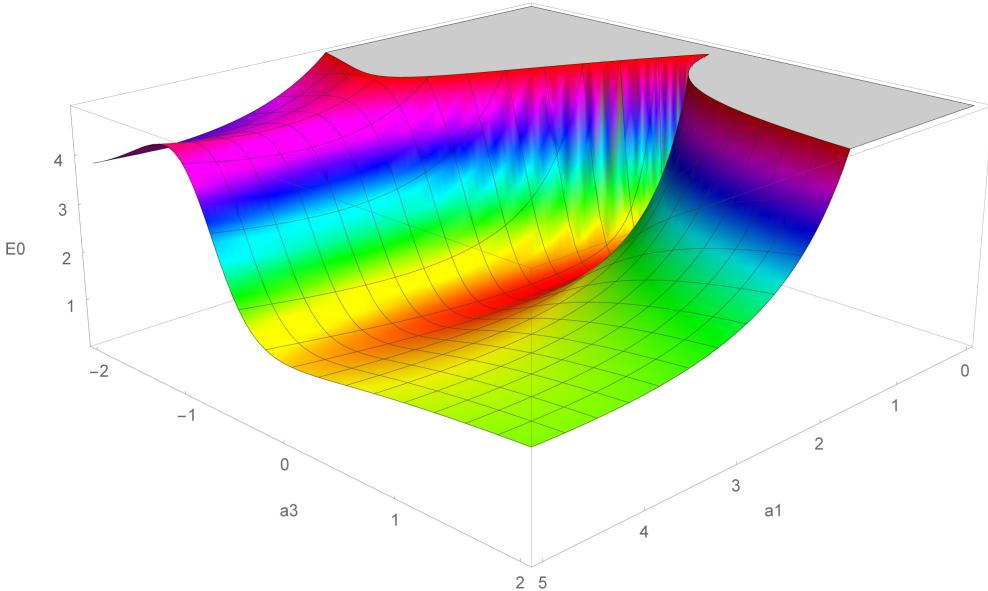


Abbildung 3: Grundzustandsenergie \hat{E}_0 um das Minimum herum für verschiedene $\hat{\alpha}_1$ und $\hat{\alpha}_3$ bei festem $\hat{\alpha}_2$.

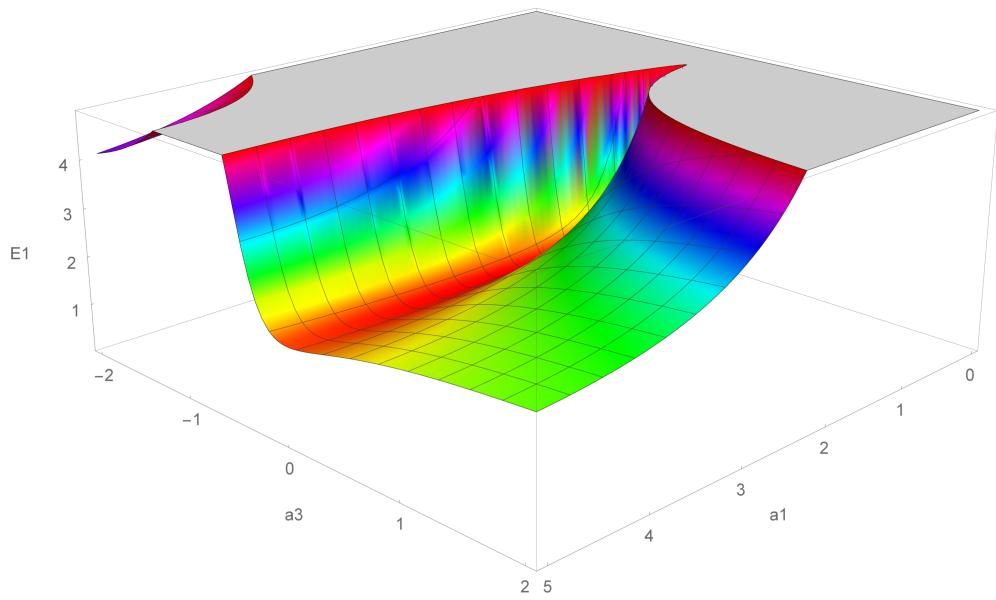


Abbildung 4: Energie des ersten angeregten Zustands \hat{E}_1 um das Minimum herum für verschiedene $\hat{\alpha}_1$ und $\hat{\alpha}_3$ bei festem $\hat{\alpha}_2$.

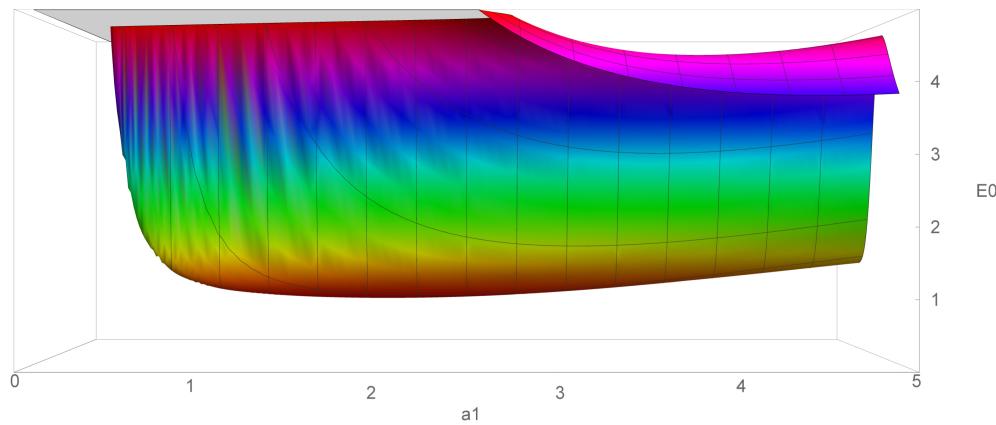


Abbildung 5: Abhängigkeit der Grundzustandsenergie \hat{E}_0 von $\hat{\alpha}_1$ um das Minimum herum.

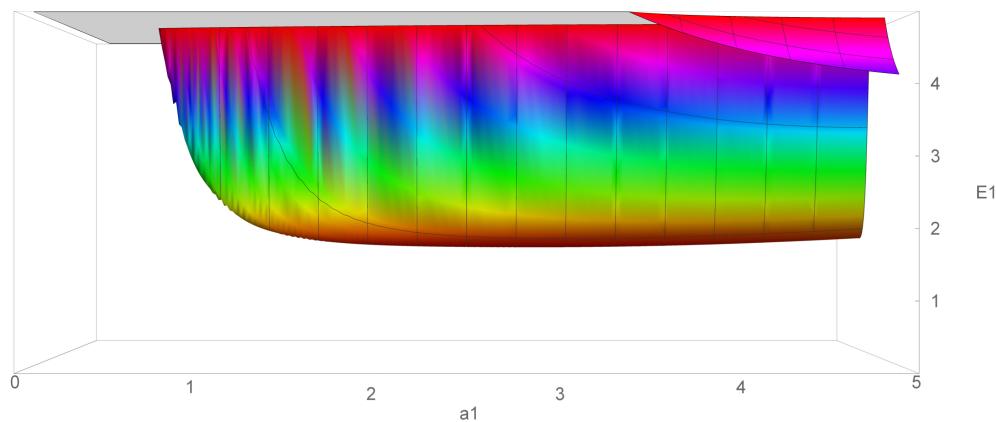


Abbildung 6: Abhängigkeit der Energie des ersten angeregten Zustands \hat{E}_1 von $\hat{\alpha}_1$ um das Minimum herum.

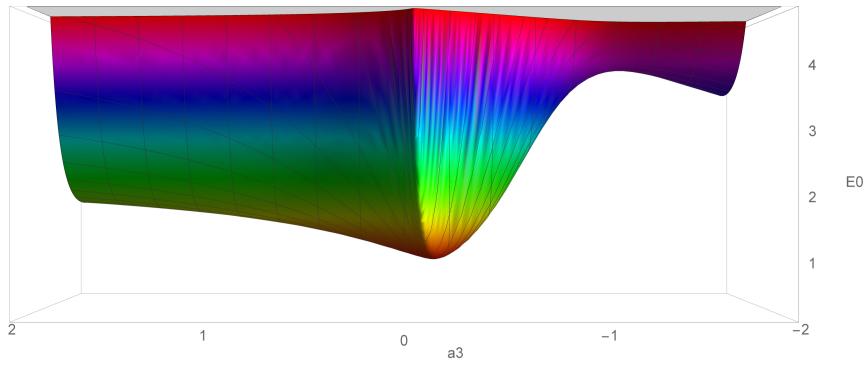


Abbildung 7: Abhangigkeit der Grundzustandsenergie \hat{E}_0 von $\hat{\alpha}_3$ um das Minimum herum.

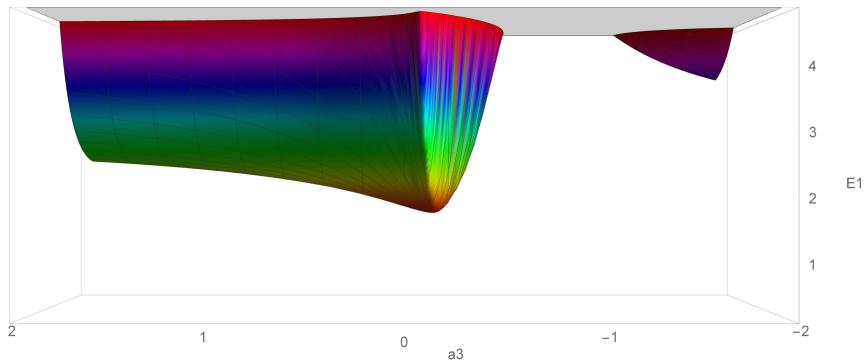


Abbildung 8: Abhangigkeit der Energie \hat{E}_1 von $\hat{\alpha}_3$ um das Minimum herum.

Wie man sieht, befindet sich die minimale Energie sowohl bei dem Grundzustand als auch bei dem ersten angeregten Zustand jeweils in einer Art Mulde. Das Minimum bezuglich des Parameters $\hat{\alpha}_3$ kann man klar erkennen, das Minimum bezuglich $\hat{\alpha}_1$ ist jedoch sehr flach.

Die dazugehorigen Wellenfunktionen haben folgende Gestalt:

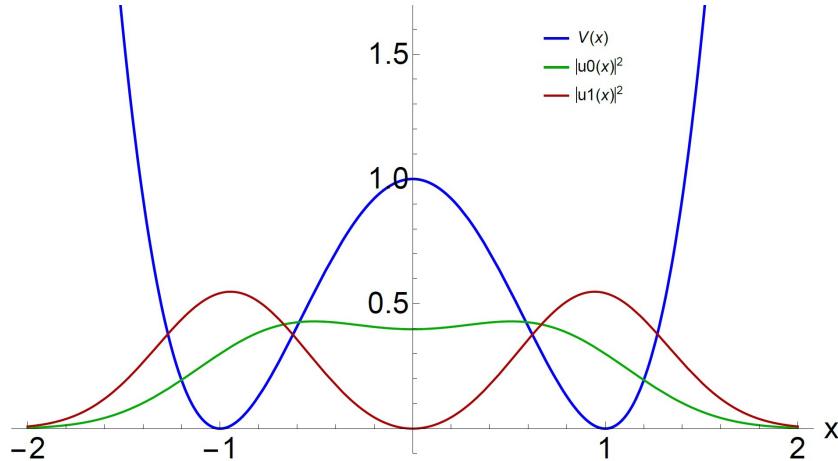


Abbildung 9: Das Potential und das Betragsquadrat der normierten, entdimensionalisierten Wellenfunktionen $u_0(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3, \hat{x})$ und $u_1(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3, \hat{x})$ fur den Fall $\hat{\lambda} = 1$.

Das Betragsquadrat der Wellenfunktion des Grundzustands bildet fur den Fall $\hat{\lambda} = 1$ beinahe ein Plateau welches von etwa $\hat{x} = -0.6$ bis $\hat{x} = 0.6$ reicht, wohingegen beim dem ersten angeregten Zustand, wie eigentlich zu erwarten war, das Teilchen am scharfsten in den Mulden lokalisiert ist.

3 Vergleich mit Zinn-Justin, Jentschura und Caswell

In diesem Abschnitt soll das Ergebnis der Variationsrechnung mit dem von Zinn-Justin und Jentschura, welche die Methode des quantenmechanischen Pfadintegrals für dasselbe Problem angewandt haben, und den Ergebnissen von Caswell verglichen werden. Der Vergleich wird zuerst für Zinn-Justin und Jentschura durchgeführt und im Anschluss daran der Vergleich mit Caswell.

Da Zinn-Justin und Jentschura eine andere Notation für den Hamiltonoperator in ihrer Arbeit verwendeten, muss dieser zunächst umgeschrieben werden. Dort lautet der Hamiltonoperator

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{1}{2} q^2 \cdot (1 - \sqrt{g} \cdot q)^2. \quad (3.1)$$

Der Hamiltonoperator der Variationsrechnung aus 2.14 soll nun auch in dieselbe Form gebracht werden.

$$H = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \hat{x}^2} + \hat{\lambda}(\hat{x}^2 - 1)^2 \quad (3.2)$$

$$= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \hat{x}^2} + \hat{\lambda}((\hat{x} + 1 - 1)^2 - 1)^2 \quad (3.3)$$

$$= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \hat{\lambda}((s - 1)^2 - 1)^2 \quad \text{mit } s = \hat{x} + 1 \quad (3.4)$$

$$= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \hat{\lambda}(s^2 - 2s)^2 \quad (3.5)$$

$$= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \hat{\lambda} \cdot s^2 \cdot (s - 2)^2 \quad (3.6)$$

$$= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} k^2 + \hat{\lambda} \cdot \frac{q^2}{k^2} \cdot (\frac{q}{k} - 2)^2 \quad \text{mit } q = s \cdot k \quad (3.7)$$

$$= k^2 \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{4\hat{\lambda}}{k^4} \cdot q^2 \cdot (1 - \frac{q}{2k})^2 \right) \quad (3.8)$$

Durch Koeffizientenvergleich stellt man fest, dass $\frac{1}{2k} \stackrel{!}{=} \sqrt{g}$ und $\frac{4\hat{\lambda}}{k^4} \stackrel{!}{=} \frac{1}{2}$ ist und somit folgende Beziehungen gelten

$$\hat{\lambda} = \frac{1}{128} \frac{1}{g^2} \quad (3.9)$$

$$\hat{E}_P = \hat{E} \cdot 4g, \quad (3.10)$$

hierbei bezeichnet \hat{E}_P die Energie der Pfadintegralmethode.

Im Folgenden sind die absoluten Energiewerte des Grundzustands und des ersten angeregten Zustands der Pfadintegralmethode und der Variationsrechnung für Werte von $g = 0.001, 0.002, 0.005, 0.007$ und 0.01 aufgelistet. Die Energiewerte der Variationsrechnung werden mit \hat{E}_i bezeichnet, die der Pfadintegralmethode mit $\hat{E}_{i,P}$. Die rot-unterstrichenen Ziffern kennzeichnen die Ziffern, die \hat{E}_0 und \hat{E}_1 bei demselben Wert von g gemeinsam haben, die blau unterlegten entsprechend die Ziffern, die $\hat{E}_{0,P}$ und $\hat{E}_{1,P}$ bei gleichem g gemeinsam haben. Die Werte für $\hat{E}_{i,P}$ für $g = 0.001$ stammen aus [4] und alle anderen aus [5].

$$\begin{aligned} \hat{E}_0(g = 0.001) &= \underline{0.49903} \underline{70773} \underline{82607} \underline{48022} \underline{75808} \underline{50035} \underline{65166} \underline{65943} \underline{42891} \underline{02631} \\ &\quad \underline{76096} \underline{85808} \underline{49955} \underline{86671} \underline{89390} \underline{02033} \underline{25661} \underline{91053} \underline{68669} \underline{34624} \\ &\quad 26899 \underline{25915} \underline{68383} \underline{65598} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{E}_{0,P}(g = 0.001) &= \underline{0.49899} \underline{54548} \underline{62109} \underline{17168} \underline{91308} \underline{39481} \underline{92163} \underline{68209} \underline{47240} \underline{20809} \\ &\quad \underline{66532} \underline{93278} \underline{69722} \underline{01391} \underline{15135} \underline{28505} \underline{38294} \underline{45798} \underline{45759} \underline{95999} \\ &\quad 06739 \underline{55175} \underline{84722} \underline{67802} \end{aligned}$$

$$\hat{E}_1(g = 0.001) = \underline{0.49903} \underline{70773} \underline{82607} \underline{48022} \underline{75808} \underline{50035} \underline{65166} \underline{65943} \underline{42891} \underline{02631} \\ \underline{76096} \underline{85808} \underline{49955} \underline{86671} \underline{89390} \underline{02033} \underline{25661} \underline{91053} \underline{68669} \underline{34637} \\ \underline{39850} \underline{02419} \underline{30171} \underline{62817}$$

$$\hat{E}_{1,P}(g = 0.001) = \underline{0.49899} \underline{54548} \underline{62109} \underline{17168} \underline{91308} \underline{39481} \underline{92163} \underline{68209} \underline{47240} \underline{20809} \\ \underline{66532} \underline{93278} \underline{69722} \underline{01391} \underline{29839} \underline{92959} \underline{55803} \underline{70812} \underline{27749} \underline{92448} \\ \underline{48259} \underline{36743} \underline{64757} \underline{68328}$$

$$\hat{E}_0(g = 0.002) = \underline{0.49808} \underline{92023} \underline{14790} \underline{63879} \underline{63399} \underline{66143} \underline{44275} \underline{72745} \underline{76446} \underline{23620} \\ \underline{86349} \underline{05811} \underline{28519} \underline{67953} \underline{92877} \underline{15464}$$

$$\hat{E}_{0,P}(g = 0.002) = \underline{0.49798} \underline{16336} \underline{05614} \underline{52785} \underline{33444} \underline{97756} \underline{93929} \underline{30135} \underline{47830} \underline{41905} \\ \underline{18141} \underline{65406} \underline{30388} \underline{85981} \underline{28620} \underline{52208}$$

$$\hat{E}_1(g = 0.002) = \underline{0.49808} \underline{92023} \underline{14790} \underline{63879} \underline{63399} \underline{66143} \underline{44275} \underline{72745} \underline{76446} \underline{23776} \\ \underline{27681} \underline{49052} \underline{39156} \underline{80171} \underline{44637} \underline{71789}$$

$$\hat{E}_{1,P}(g = 0.002) = \underline{0.49798} \underline{16336} \underline{05614} \underline{52785} \underline{33444} \underline{97756} \underline{93930} \underline{90653} \underline{58949} \underline{74478} \\ \underline{49607} \underline{06416} \underline{37435} \underline{43472} \underline{00173} \underline{52993}$$

$$\hat{E}_0(g = 0.005) = \underline{0.49526} \underline{64494} \underline{63102} \underline{04569} \underline{61846} \underline{11096} \underline{08040} \underline{89407} \underline{21026}$$

$$\hat{E}_{0,P}(g = 0.005) = \underline{0.49488} \underline{15073} \underline{20647} \underline{62721} \underline{54849} \underline{56033} \underline{00402} \underline{87323} \underline{00532}$$

$$\hat{E}_1(g = 0.005) = \underline{0.49526} \underline{64494} \underline{63102} \underline{04767} \underline{88215} \underline{73950} \underline{46006} \underline{03294} \underline{06067}$$

$$\hat{E}_{1,P}(g = 0.005) = \underline{0.49488} \underline{15073} \underline{20699} \underline{29084} \underline{80981} \underline{89004} \underline{43542} \underline{33907} \underline{22906}$$

$$\hat{E}_0(g = 0.007) = \underline{0.49338} \underline{44059} \underline{54975} \underline{47933} \underline{24004} \underline{10457} \underline{36493} \underline{77541}$$

$$\hat{E}_{0,P}(g = 0.007) = \underline{0.49276} \underline{25138} \underline{3455} \underline{88807} \underline{85274} \underline{35274} \underline{12515} \underline{77733}$$

$$\hat{E}_1(g = 0.007) = \underline{0.49338} \underline{44059} \underline{55778} \underline{30946} \underline{10879} \underline{12099} \underline{58118} \underline{89602}$$

$$\hat{E}_{1,P}(g = 0.007) = \underline{0.49276} \underline{25144} \underline{24291} \underline{38099} \underline{89370} \underline{58280} \underline{41759} \underline{92080}$$

$$\hat{E}_0(g = 0.01) = \underline{0.49054} \underline{54312} \underline{96589}$$

$$\hat{E}_{0,P}(g = 0.01) = \underline{0.48949} \underline{75209} \underline{76030}$$

$$\hat{E}_1(g = 0.01) = \underline{0.49054} \underline{54422} \underline{99278}$$

$$\hat{E}_{1,P}(g = 0.01) = \underline{0.48949} \underline{81327} \underline{21197}$$

Man erkennt anhand der Werte, dass die Energien der Variationsrechnung nahe an den Werten der Pfadintegralmethode liegen und immer leicht größer sind. Außerdem sieht man, dass die Energien der Variationsrechnung für jedes hier gegebene g über mehr Ziffern übereinstimmen, als dies der Fall bei der Methode der Pfadintegrale ist.

Die dazugehörigen Energiedifferenzen betragen:

g	$\Delta\hat{E}$	$\Delta\hat{E}_P$
0.001	$1.313 \cdot 10^{-99}$	$1.470 \cdot 10^{-71}$
0.002	$1.554 \cdot 10^{-48}$	$1.605 \cdot 10^{-35}$
0.005	$1.983 \cdot 10^{-18}$	$5.166 \cdot 10^{-14}$
0.007	$8.028 \cdot 10^{-13}$	$5.897 \cdot 10^{-10}$
0.01	$1.100 \cdot 10^{-8}$	$6.117 \cdot 10^{-7}$

Tabelle 4: Die Differenz der Energien des ersten anregten Zustands und des Grundzustands $\Delta\hat{E}$ der Variationsmethode und $\Delta\hat{E}_P$ der Pfadintegralmethode für verschiedene Werte von g .

Gemäß der obigen Tabelle ist die Energiedifferenz $\Delta\hat{E}$ der Variationsmethode für jedes hier gewählte g größer als die der Pfadintegralmethode. Die Energiedifferenz wird auf den nächsten Seiten näher untersucht werden.

Beispielhaft wird hier das Betragsquadrat der beiden Wellenfunktionen, die sich nach der Variationsrechnung für den Wert $g = 0.005$ ergeben, dargestellt.

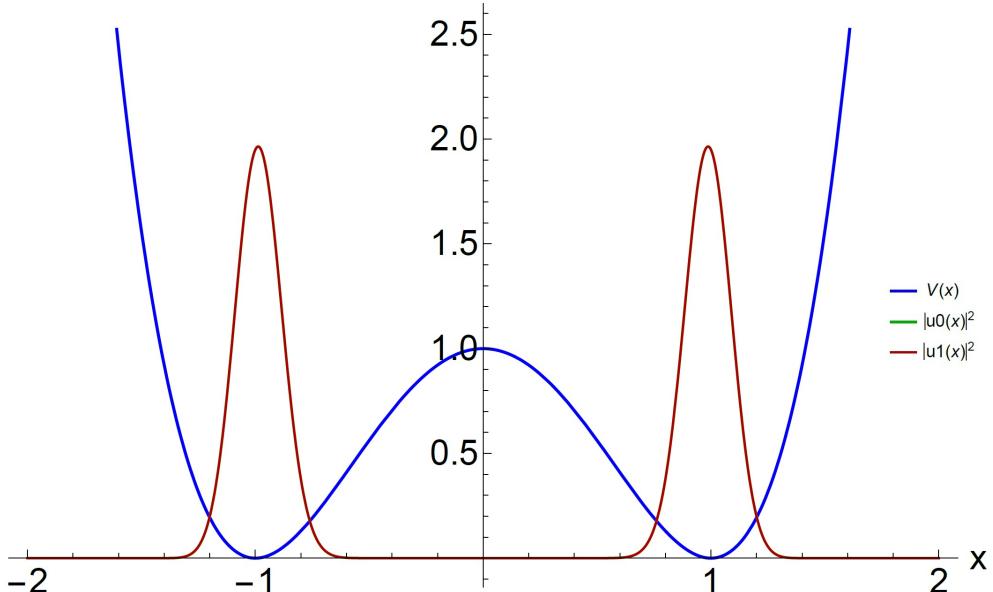


Abbildung 10: Das Potential und das Betragsquadrat der normierten, entdimensionalisierten Wellenfunktionen $u_0(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3, \hat{x})$ und $u_1(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3, \hat{x})$ für den Fall $g = 0.005$.

Da die drei Parameter der beiden Wellenfunktionen über einige Ziffern übereinstimmen, kann man sie in der Abbildung nicht voneinander unterscheiden, da sie überlappen. Generell lässt sich anhand der Grafik sagen, dass die Wellenfunktionen im Vergleich zu der Abbildung 9 viel stärker in den beiden Mulden lokalisiert sind.

Es werden nun im Folgenden die Energiedifferenzen der Variationsmethode mit den Energiedifferenzen, die sich nach Zinn-Justin und Jentschura ergeben, verglichen werden. Die hier bis zur 2. Ordnung in g betrachteten Energiedifferenzen der Pfadintegralmethode lauten:

$$\Delta\hat{E}_P^{(0)} = \frac{2}{\sqrt{\pi}g} \exp\left[-\frac{1}{6g}\right] \quad (3.11)$$

$$\Delta\hat{E}_P^{(1)} = \frac{2}{\sqrt{\pi}g} \exp\left[-\frac{1}{6g}\right] \cdot \left(1 - \frac{71}{12}g\right) \quad (3.12)$$

$$\Delta\hat{E}_P^{(2)} = \frac{2}{\sqrt{\pi}g} \exp\left[-\frac{1}{6g}\right] \cdot \left(1 - \frac{71}{12}g - \frac{6299}{288}g^2\right) \quad (3.13)$$

In den beiden unten stehenden Abbildungen wurde das Verhältnis der Energiedifferenz der Variationsmethode und der Energiedifferenz der Pfadintegralmethode für verschiedene, kleine Werte von g gebildet und grafisch aufgetragen. Die Beschränkung auf kleine g begründet sich damit, dass die Formeln ihre Gültigkeit für größere Werte von g verlieren. So wird zum Beispiel die Energiedifferenz in der ersten Ordnung $\Delta\hat{E}_P^{(1)}$ bereits ab einem Wert von $g \approx 0.169$ negativ, was physikalisch keinen Sinn ergibt. Dieses Problem tritt zwar bei $\Delta\hat{E}_P^{(0)}$ nicht auf, da die Funktion keine Nullstellen besitzt, aber es ist nicht davon auszugehen, dass die Funktion für größere Werte von g noch gute Ergebnisse liefert und deswegen wird auch diese nur bei kleinen g betrachtet.

Verhältnis der Energien

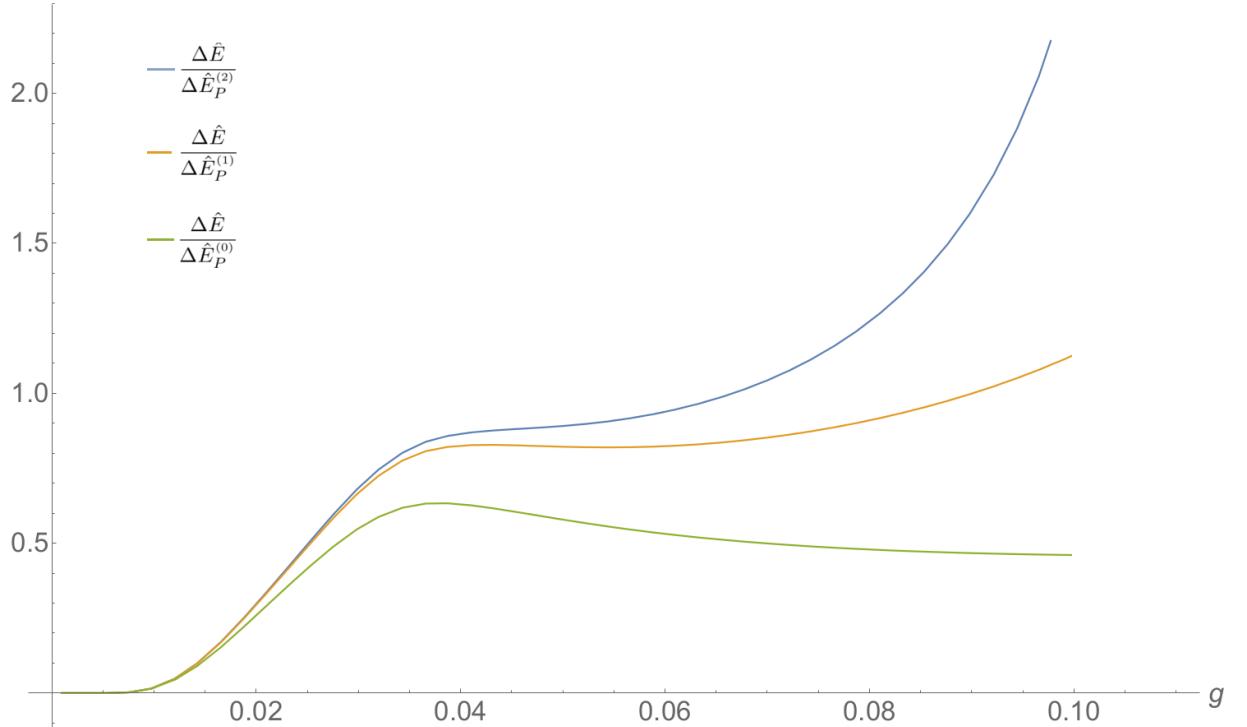


Abbildung 11: Das Verhältnis der beiden Energiedifferenzen für $0.001 \leq g \leq 0.10$.

In der Abbildung 11 sieht man, dass die drei Verhältnisse der Energiedifferenzen für Werte kleiner als $g \approx 0.015$ in etwa übereinstimmen, für größere Werte sich jedoch ein deutlicher Unterschied erkennen lässt. Aufgrund dieses starken Unterschieds, sollten die Werte ab $g \approx 0.035$ nicht mehr betrachtet werden und für kleinere g am besten die Energiedifferenz durch $\Delta\hat{E}_P^{(2)}$ beschrieben werden. Zinn-Justin und Jentschura selbst betrachten höchstens Werte bis $g = 0.03$. Für sehr kleine Werte von g ist das Verhältnis ebenfalls sehr klein, das bedeutet die Energiedifferenz der Variationsrechnung ist viel geringer als die, die sich nach Zinn-Justin und Jentschura ergibt. Für größere Werte von g steigen all drei Verhältnisse an. So erreicht $\frac{\Delta\hat{E}}{\Delta\hat{E}_P^{(0)}}$ den maximalen Wert von etwa 0.65 bei $g \approx 0.035$ und sinkt danach für noch größere Werte von g auf etwa 0.5. Das Verhältnis $\frac{\Delta\hat{E}}{\Delta\hat{E}_P^{(1)}}$ steigt bis zu einem Wert von 0.85 bei $g \approx 0.04$ an, sinkt dann leicht ab bevor es wieder anfängt anzusteigen. Ähnlich verhält es sich mit $\frac{\Delta\hat{E}}{\Delta\hat{E}_P^{(2)}}$, auch hier steigt das Verhältnis zunächst auf einen Wert von etwa 0.9 an, der Anstieg flacht dann für einen kleinen Bereich ab und das Verhältnis steigt danach wieder sehr stark an. Die Anstiege von $\Delta\hat{E}_P^{(2)}$ bei $g \approx 0.05$ und von $\Delta\hat{E}_P^{(1)}$ bei $g \approx 0.06$ sind darauf zurückzuführen, dass die Energiedifferenz der Pfadintegralmethode ab einem bestimmten Wert von g anfängt zu sinken und sogar negativ wird.

Nachdem der Vergleich mit Zinn-Justin und Jentschura abgeschlossen ist, sollen nun die Ergebnisse der Variationsrechnung mit dem Ergebnis von Caswell^[6] verglichen werden. Auch hier muss zunächst der Hamiltonoperator umskaliert werden, in seiner lautet dieser:

$$H_C = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \tilde{\lambda} \tilde{x}^4 - \frac{1}{2} \tilde{x}^2. \quad (3.14)$$

Die Umskalierung in die obige Form erfolgt durch folgende Rechnung

$$\begin{aligned} & H|u_i(x)\rangle = E_i \cdot |u_i(x)\rangle \\ \Leftrightarrow & \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \hat{x}^2} + \hat{\lambda}(\hat{x}^2 - 1)^2 \right) |u_i(\hat{x})\rangle = \hat{E}_i \cdot |u_i(\hat{x})\rangle \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$\Leftrightarrow \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \hat{x}^2} + \hat{\lambda} \hat{x}^4 - 2\hat{\lambda} \hat{x}^2 + \hat{\lambda} \right) |u_i(\hat{x})\rangle = \hat{E}_i \cdot |u_i(\hat{x})\rangle \quad (3.16)$$

$$\Leftrightarrow \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2 \alpha^2} + \hat{\lambda} \tilde{x}^4 \alpha^4 - 2\hat{\lambda} \tilde{x}^2 \alpha^2 + \hat{\lambda} \right) |u_i(\tilde{x})\rangle = \hat{E}_i \cdot |u_i(\tilde{x})\rangle \quad \text{mit } \hat{x} = \tilde{x} \alpha \quad (3.17)$$

$$\Leftrightarrow \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \hat{\lambda} \alpha^6 \tilde{x}^4 - 2\hat{\lambda} \alpha^4 \tilde{x}^2 \right) |u_i(\tilde{x})\rangle = \alpha^2 (\hat{E}_i - \hat{\lambda}) \cdot |u_i(\tilde{x})\rangle. \quad (3.18)$$

An dieser Stelle wird gefordert, dass $2\hat{\lambda}\alpha^4 = \frac{1}{2}$ gilt, um so eine Gleichheit mit dem Hamiltonoperator H_C zu erreichen. Aus dieser Forderung folgert man

$$\alpha = \left(\frac{1}{4\hat{\lambda}} \right)^{(1/4)} \quad (3.19)$$

und mit der Definition

$$\tilde{\lambda} := \hat{\lambda} \alpha^6 \quad (3.20)$$

$$= \frac{1}{8} \frac{1}{\sqrt{\hat{\lambda}}} \quad (3.21)$$

$$\rightarrow \hat{\lambda} = \frac{1}{64} \frac{1}{\tilde{\lambda}^2} = \frac{1}{128} \frac{1}{g^2} \quad (3.22)$$

findet man die umskalierte Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \tilde{\lambda} \tilde{x}^4 - \frac{1}{2} \tilde{x}^2 \right) |u_i(\tilde{x})\rangle = (\tilde{E}_i - \alpha^2 \hat{\lambda}) \cdot |u_i(\tilde{x})\rangle \quad (3.23)$$

mit der Energie $\tilde{E}_i = \alpha^2 \hat{E}_i$. Dieser Hamiltonoperator besitzt nun genau dieselbe Struktur der Hamiltonoperator H_C .

Wie in 3.22 zu erkennen ist, existiert eine einfache Beziehung zwischen $\tilde{\lambda}$ und dem g aus der Rechnung von Zinn-Justin und Jentschura, diese Beziehung ist gegeben durch $g = \tilde{\lambda}/\sqrt{2}$. Da Caswell in seiner Arbeit bis zu Werten von $\tilde{\lambda} = 100$ geht, sind diese für den Vergleich von besonderem Interesse, da dies den Bereich von großen g abdeckt, was bei Zinn-Justin und Jentschura nicht der Fall ist.

Es sollen nun die Energien des Grundzustands und des ersten angeregten Zustands der Variationsrechnung mit den Ergebnissen von Caswell verglichen werden. Folgender Punkt ist für den Vergleich jedoch von entscheidender Bedeutung: In den Tabellen IV und V seiner Arbeit listet Caswell die Energien ohne den Wert $\alpha^2 \hat{\lambda}$ von diesen abzuziehen. Dies ist sofort ersichtlich, wenn man die Energien für den Fall $\tilde{\lambda} = 0.1$ in Tabelle IV betrachtet und diese mit den in der Grafik 3 seiner Arbeit dargestellten Energien vergleicht. So sollte die Grundzustandsenergie laut der Tabelle 0.4709 betragen, in der Grafik ist diese aber negativ. Drückt man nun den Wert $\alpha^2 \hat{\lambda}$ mit Hilfe von 3.19 und 3.22 durch $\tilde{\lambda} = 0.1$ aus, so ergibt sich $\alpha^2 \hat{\lambda} = 0.625$ und damit $0.4709 - 0.625 = -0.1541$. Diese Energie stimmt nun mit dem in der Abbildung 3 aus Caswell's Arbeit dargestellten Wert für die Grundzustandsenergie überein.

Aus diesem Grund wird im Folgenden bei den Variationsrechnungen ebenfalls auf die Subtraktion von $\alpha^2 \hat{\lambda}$ verzichtet, um die Werte mit denen in den Tabellen IV und V von Caswell's Arbeit leichter vergleichen zu können. In der nachfolgenden Tabelle sind jeweils die beiden Energien der Variationsrechnung \tilde{E}_i und die Vergleichswerte von Caswell $\tilde{E}_{i,C}$ aufgelistet.

$\tilde{\lambda}$	\tilde{E}_0	$\tilde{E}_{0,C}$	\tilde{E}_1	$\tilde{E}_{1,C}$
0.1	0.4734	0.4709	0.76888	0.76776
1	0.57753651	0.57728042	2.08339999	2.08305212
10	1.37812359	1.37781685	4.99616436	4.99566652
100	3.07151070	3.07010341	11.03699508	11.03370601
0.0391	0.663		0.674	0.61
0.0494	0.631	0.55	0.676	0.67
0.0988	0.476	0.473	0.766	0.765
0.198	0.398	0.398	1.01	1.01

Tabelle 5: Die Grundzustandsenergie und die Energie des ersten angeregten Zustands der beiden Methoden bei verschiedenen Werten von $\tilde{\lambda}$. Es existiert kein Wert von $\tilde{E}_{0,C}$ für $\tilde{\lambda} = 0.0391$.

Bis auf die Werte der Energie des ersten angeregten Zustands \tilde{E}_1 bei $\tilde{\lambda} = 0.0391$ und der Grundzustandsenergie \tilde{E}_0 für $\tilde{\lambda} = 0.0494$ stimmen die Energien, die sich nach der Variationsrechnung ergeben, mindestens auf zwei Nachkommastellen hin mit dem Ergebnis von Caswell überein.

4 Die Funktionsweise eines Masers

Der Begriff Maser steht für Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation, dies bezeichnet ein System, welches mit Hilfe von stimulierter Emission kohärente Mikrowellenstrahlung erzeugt. Der erste Maser wurde 1954 an der Columbia University in New York von Charles H. Townes und seinen zwei Studenten James P. Gordon und Herbert Zeiger gebaut, dieser emittierte Mikrowellenstrahlung der Frequenz $\nu_0 = 23.874 \text{ GHz}$. Die Energieaufspaltung zwischen dem ersten angeregten Zustand und dem Grundzustand ist mit $9.87 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$ äußerst gering. Technisch wurde der Maser folgendermaßen realisiert: Sowohl der Grundzustand als auch der erste angeregte Zustand des Ammoniak-Moleküls besitzen ein permanentes, zueinander entgegengesetztes elektrisches Dipolmoment. Aus diesem Grund wird ein Strahl aus Ammoniak-Molekülen durch ein inhomogenes elektrisches Feld geschickt und aufgrund der unterschiedlichen Dipolmomente wird der Strahl aufgespalten. Diejenigen Moleküle, die sich im Grundzustand befanden, wurden wegen des elektrischen Feldes aus ihrer Flugbahn gelenkt wohingegen die Moleküle, die sich im ersten angeregten Zustand befanden, eine fokussierende Wirkung erfuhren. Dadurch befanden sich in dem verbleibenden Strahl viel mehr Moleküle in dem ersten angeregten Zustand als in dem Grundzustand und es lag somit eine Besetzungsinvolution vor. Der verbleibende Strahl wurde in einen Resonator eingespeist und eine einmalige, kurzzeitige Bestrahlung durch eine externe Strahlerquelle der Frequenz $\nu_{ext} = 24 \text{ GHz}$ bewirkte das Einsetzen der stimulierten Emission. Diese wird nun durch den ständigen Fluss an neuen, angeregten Molekülen sich selbst aufrechterhalten und ein Teil der Strahlung wird den Resonator kontrolliert verlassen und kann für verschiedene Zwecke verwendet werden.^{[1],[7]}

Zum Abschluss soll nun die Energiedifferenz zwischen Grundzustand und erstem angeregten Zustand für das Ammoniak-Molekül mit der Variationsrechnung und der Methode nach Zinn-Justin und Jentschura ausgewertet werden. Die Parameter für das Ammoniak-Molekül sind gegeben durch:

$$a = 3.8 \cdot 10^{-11} \text{ m} \quad (4.1)$$

$$V(0) = 0.25 \text{ eV} = 4.00544 \cdot 10^{-20} \text{ J} \quad (4.2)$$

$$m = \frac{3m_H \cdot m_N}{3m_H + m_N} = 2.48693 \text{ u} = 4,12964 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \quad (4.3)$$

Der Wert a stammt aus [8], der Wert für das Potential aus [9] und die Massen von Wasserstoff und Stickstoff wurden entnommen aus [10].

Die Größe λ findet man durch

$$V(0) = \lambda a^4 = 4.005 \cdot 10^{-20} \text{ J} \quad (4.4)$$

$$\rightarrow \lambda = 1.92095 \cdot 10^{22} \text{ J/m}^4. \quad (4.5)$$

Damit kann man nun $\hat{\lambda}$ und somit auch g berechnen:

$$\hat{\lambda} = \frac{\lambda m}{\hbar^2} a^6 = 21.4772 \quad (4.6)$$

$$\rightarrow g = \sqrt{\frac{1}{128\hat{\lambda}}} = 0.01907 \quad (4.7)$$

Die Energie der Variationsmethode berechnet sich aus \hat{E} mit der Beziehung

$$E = \hat{E} \frac{\hbar^2}{m \cdot a^2} \quad (4.8)$$

und die der Pfadintegralmethode aus

$$E_P = \hat{E}_P \frac{\hbar^2}{m \cdot a^2} \frac{1}{4g}. \quad (4.9)$$

Das Ergebnis der Variationsrechnung und die dazugehörige Frequenz beträgt

$$\Delta E = 7.34428 \cdot 10^{-24} \text{ J} \quad \rightarrow \quad \nu = 11.084 \text{ GHz} \quad (4.10)$$

und das Ergebnis der Rechnung mit der Energiedifferenz nach Zinn-Justin und Jentschura liefert

$$\Delta E_P^{(0)} = 3.1983 \cdot 10^{-23} \text{ J} \quad \rightarrow \quad \nu = 48.269 \text{ GHz} \quad (4.11)$$

$$\Delta E_P^{(1)} = 2.8375 \cdot 10^{-23} \text{ J} \quad \rightarrow \quad \nu = 42.823 \text{ GHz} \quad (4.12)$$

$$\Delta E_P^{(2)} = 2.8120 \cdot 10^{-23} \text{ J} \quad \rightarrow \quad \nu = 42.439 \text{ GHz.} \quad (4.13)$$

Anhand der Werte lässt sich ablesen, dass bei der Pfadintegralmethode $\Delta E_P^{(2)}$ das beste Ergebnis liefert, die dazugehörige Frequenz liegt 18.565 GHz über der tatsächlichen Frequenz $\nu_0 = 23.874$ GHz. Die Frequenz, die sich nach der Variationsrechnung ergibt, liegt 12.79 GHz unter ν_0 und somit näher an der tatsächlichen Frequenz, als dies der Fall bei der Pfadintegralmethode ist.

5 Zusammenfassung und Diskussion der Ergebnisse

Mit den an den harmonischen Oszillator angelehnten Testwellenfunktionen konnte analytisch ein Ausdruck für die Energie des Grundzustands und des ersten angeregten Zustands in Abhängigkeit der drei Parameter $\hat{\alpha}_1$, $\hat{\alpha}_2$ und $\hat{\alpha}_3$ gefunden werden.

Die anschließende numerische Minimierung dieses Ausdrucks mit dem Programm *Mathematica* 10.1 konnte problemlos durchgeführt werden und lieferte für jeden Wert von $\hat{\lambda}$ beziehungsweise von g eine obere Schranke für die jeweilige Energie. Es stellte sich heraus, dass je größer $\hat{\lambda}$ wird, desto näher liegen die Energie des Grundzustands und des ersten anregten Zustands zusammen und die drei Parameter $\hat{\alpha}_1$, $\hat{\alpha}_2$ und $\hat{\alpha}_3$ liegen alle sehr nah beieinander. Der Wert von $\hat{\alpha}_1$ stimmt mit den Werten, die sich für einen harmonischen Oszillator ergeben sollten, nur von der Größenordnung her überein und die naheliegende Vermutung, dass $\hat{\alpha}_2 = 1$ gilt und somit das Teilchen in den Minima des Potentials lokalisiert ist, bestätigt sich insbesondere bei größeren Werten von $\hat{\lambda}$. Der Wert von $\hat{\alpha}_3$ ist für die meisten Werte von $\hat{\lambda}$ negativ.

Der Vergleich der Energiewerte mit Literaturwerten von Zinn-Justin und Jentschura zeigte, dass die Abweichung bei den betrachteten Werten sehr klein ist und maximal nur etwa 0.001 beträgt. Dies ist ein Erfolg der Variationsrechnung, wenn man bedenkt, dass die Testwellenfunktionen einfach an die Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators angelehnt sind. Gleichzeitig stellte sich bei den betrachteten kleinen Werten von g heraus, dass die Energien der Variationsrechnung über mehr Ziffern übereinstimmen, als dies der Fall bei Zinn-Justin und Jentschura der Fall ist.

Dieser deutliche Unterschied kam nochmals bei der genaueren Betrachtung der Energiedifferenzen zwischen dem ersten angeregten Zustand und dem Grundzustand heraus. Die Übereinstimmung mit der Differenz, die sich gemäß der Pfadintegralmethode von Zinn-Justin und Jentschura ergibt, ist gering. Insbesondere ist der Unterschied der beiden Methoden bei sehr kleinen Werten von g sehr groß. Auch zeigte sich, dass sich, je nach der gewählten Ordnung von g der Formeln von Zinn-Justin und Jentschura, große Unterschiede bei den Energiedifferenzen einstellen, insbesondere bei größeren g .

Der Vergleich mit den Energiewerten von Caswell, die insbesondere auch den Bereich von großen g abdecken, ist ebenfalls gut ausgefallen und es stellte sich bei fast allen betrachteten Werten eine sehr gute Übereinstimmung der Energien ein.

Allgemein erkennt man, dass die Energien der Variationsrechnung immer über den Vergleichswerten der Literatur liegen. Die anderen Methoden liefern also bessere Ergebnisse als die hier durchgeführte Variationsrechnung, da sie eine niedrigere obere Schranke für die tatsächlichen Energien darstellen.

Bei der konkreten Berechnung der Energieaufspaltung des Ammoniak-Moleküls stellt sich heraus, dass die Variationsrechnung mit $\nu = 11.084 \text{ GHz}$ zwar ein besseres Ergebnis als die Pfadintegralmethode von Zinn-Justin und Jentschura liefert, dennoch ist die Abweichung von dem tatsächlichen Wert $\nu_0 = 23.874 \text{ GHz}$ groß.

Ein Kritikpunkt der Variationsmethode und der damit verbundenen numerischen Minimierung mit *Mathematica* 10.1 ist, dass die Minimierung empfindlich auf die gewählten Einschränkungen reagiert und es teils schwierig war möglichst gute und sinnvolle Einschränkungen zu wählen. Unter Umständen lassen sich die Energiewerte der Variationsrechnung noch ein wenig verringern, falls man die optimalen Einschränkungen findet.

Schlussendlich kann man sagen, dass die hier durchgeführte Variationsrechnung brauchbare Ergebnisse für die Energien selbst liefert, aber dass die Energiedifferenz zwischen dem Grundzustand und dem erstem angeregten Zustand bei sehr kleinen g und somit großen $\hat{\lambda}$ schlechte Ergebnisse hervorbringt und eine schlechte Übereinstimmung mit den Literaturwerten für diese Energiedifferenzen herrscht.

Literatur

- [1] M. Wilkens *Theoretische Physik III- Quantenmechanik (SS 2012)*: Übungsblatt 05, Sommersemester 2012, http://www.quantum.physik.uni-potsdam.de/teaching/ss2012/qm1/wilkens_ss2012.qm1.b05.pdf
- [2] T. Kuhn, *Skript Quantentheorie (Wintersemester 2015/16)* 12.1 Ritz'sches Variationsprinzip, S. 20
- [3] G. Münster: *Quantentheorie*, Kapitel 24, 2 Auflage, de Gruyter, 2010
- [4] J. Zinn-Justin und U. D. Jentschura, *Higher-Order Corrections to Instantons*, J. Phys. A 34 (2001) L253, <http://arxiv.org/pdf/math-ph/0103010.pdf>
- [5] J. Zinn-Justin und U. D. Jentschura, *Multi-Instantons and Exact Results II: Specific Cases, Higher-Order Effects, and Numerical Calculations*, Annals of Physics 313 (2004) 269–325. <https://arxiv.org/pdf/quant-ph/0501137v2.pdf>
- [6] W. E. Caswell, *Accurate Energy Levels for the Anharmonic Oscillator and a Summable Series for the Double-Well Potential in Perturbation Theory*, Annals of Physics 123 (1979) 153-184. <https://arxiv.org/pdf/quant-ph/0501137v2.pdf>
- [7] E. Schumacher, *Double Well application: Maser*, <http://www.chemsoft.ch/chemed/linbox6.htm>
- [8] A. Rigamonti, P. Carretta: *Structure of Matter: An Introductory Course with Problems and Solutions*, Appendix 9.1, Page 281, Third Edition, Springer, 2015
- [9] S.T. Tserkis, Ch.C. Moustakidis, S.E. Massen, and C.P. Panos, *Quantum Tunneling and Information Entropy in a Double Square Well Potential: Ammonia Molecule*, Chapter II, Physics Letters A 378(5-6):497–504, January 2014, <https://arxiv.org/pdf/1307.1104.pdf>
- [10] H. Kuchling, *Taschenbuch der Physik*, Tabelle 56, Seite 682 und 684, 20. Auflage, Fachbuchverlag Leipzig im Carl Hanser Verlag, 2011

Letzter Aufruf aller Internetseiten: 09. September 2016 um 14:35

Plagiatsklärung des Studierenden

Hiermit versichere ich, dass die vorliegende Arbeit über *Näherungsverfahren für die Energieaufspaltung im Doppelmuldenpotential* selbstständig verfasst worden ist, dass keine anderen Quellen und Hilfsmittel als die angegebenen benutzt worden sind und dass die Stellen der Arbeit, die anderen Werken – auch elektronischen Medien – dem Wortlaut oder Sinn nach entnommen wurden, auf jeden Fall unter Angabe der Quelle als Entlehnung kenntlich gemacht worden sind.

(Datum, Unterschrift)

Ich erkläre mich mit einem Abgleich der Arbeit mit anderen Texten zwecks Auffindung von Übereinstimmungen sowie mit einer zu diesem Zweck vorzunehmenden Speicherung der Arbeit in eine Datenbank einverstanden.

(Datum, Unterschrift)