

Institut für Physik
der
Technischen Universität München
Theoretische Physik

Tunneln und Reflexion langer Wellen

Michael J. Moritz

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Physik der
Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen
Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr. H.-J. Körner
Prüfer der Dissertation:
1. Univ.-Prof. Dr. H. Friedrich
2. Univ.-Prof. Dr. M. Kleber

Die Dissertation wurde am 29.11.2000 bei der Technischen Universität München
eingereicht und durch die Fakultät für Physik am 15.01.2001 angenommen.

Es werden einfache, eindimensionale Quantensysteme im Limes niedriger Energien untersucht. Die Transmission durch Barrieren und Reflexion über Stufen werden jeweils durch möglichst allgemeine, präzise und einfache Näherungen beschrieben. Für spezielle Potentialformen werden analytische Schwellengesetze angegeben. Hier dürfte insbesondere die asymptotisch ($E \rightarrow 0$) exakte Formel für die Transmission durch eine (eventuell auch verschwindende) Drehimpulsbarriere in Anwesenheit eines realistischen atomaren Potentials $\propto r^{-s}$, $s > 2$ von praktischem Interesse sein.

Simple, one-dimensional quantum systems in the limit of low energy are the subject of this work. The description of tunneling through barriers and reflection over potential steps by simple, reliable and general formulas partially based on semiclassical methods is the aim. We derive and compare such laws and the conventional ones with the (numerical) exact results for a number of examples to show their power. For special potential forms I derive analytically exact threshold laws, e.g. the transmission through a superposition of an attractive singular and a repulsive centrifugal term, which is important in atomic and molecular physics.

Wäre die Sonne nicht, es wäre Nacht trotz der anderen Gestirne

HERAKLIT

Für die,
die ich liebe

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Die semiklassische Wellenfunktion	7
1.1 Der klassische Limes	8
1.2 Herleitung der WKB-Wellenfunktion	11
1.3 Die Anschlußregeln	14
1.4 Randbedingungen an die Wellenfunktion	22
2 Tunneln	31
2.1 Tunneln durch „dichte“ Barrieren	33
2.2 Kleine Wirkung: durchlässigere Barrieren?	44
3 Klassisch verbotene Reflexion	47
3.1 Allgemeine Theorie	49
3.2 Methode der Vergleichspotentiale	56
3.3 Vergleich der Methoden	58
3.4 Die Exponential-Regel	64
3.5 Diskussion	69
4 Quantisierung und Streuung ...	71
4.1 FERMI-SEGRÈ-Formel bei $E = 0$	74
4.2 Reflexion am Potentialschwanz	79
4.3 Streulängen	80
4.4 Superposition zweier Potentialschwänze	83
4.5 Ein Beispiel	89
5 Schwelleneffekte an $\pm r^{-2}$ Potentialen	93
5.1 Dipol-Serie für einen attraktiven Schwanz	96
5.2 Tunneln durch die Zentrifugal-Barriere	104
5.2.1 Naive Herleitung der Schwellentransmission	104
5.2.2 Säkulare Störungsrechnung; Gültigkeit der Transmissionsformel	108
5.2.3 Vergleich mit der WKB-Theorie; Anwendungen	111

Zusammenfassung	119
Literaturverzeichnis	125

Abbildungsverzeichnis

2.1	Vergleichsbarriere	34
2.2	Transmission durch eine breite GAUSS-Barriere	38
2.3	Barriere mit homogenen Schwanz	39
2.4	Transmission durch eine Potenz-Barriere	40
2.5	Transmission vs. Potentialbreite	41
2.6	Transmission vs. Potentialhöhe	42
2.7	Transmission durch eine schmale Barriere	44
3.1	Stufenpotential	58
3.2	Reflexion an einer analytisch unlösbaren Stufe	60
3.3	Reflexion an einem analytisch lösbaren Schwanz	61
3.4	Reflexion vs. Stufenhöhe, $a = 10$	62
3.5	Reflexion Vs. Stufenhöhe, $a = 1$	63
3.6	Reflexion am VAN DER WAALS-Potential	65
3.7	Exponentialregel, $n = 8$ und $n = 5$	66
3.8	Exponentialregel, $n = 4$ und $n = 3$	68
4.1	Längenparameter b vs. Mischungswinkel γ	85
4.2	Phasendifferenz Φ_- vs. Mischungswinkel γ	86
4.3	Reflexionsphase Φ_0 vs. Mischungswinkel γ	88
4.4	Modell-Potential	90
4.5	Bindungsenergien im Modell-Potential	91
5.1	Schematischer Potentialverlauf	96
5.2	Parameter f der Dipolserien: Konvergenz	101
5.3	Mindestfehler der WKB-Transmission	113
5.4	Transmission beim VAN DER WAALS-Potential	115

Tabellenverzeichnis

5.1	Schwellenwerte des Serienparameters f	103
5.2	Schwellenfaktor $P(s, \gamma)$ der Transmission	107

Einleitung

Mark it, nuncle:

Have more than thou showest,

Speak less than thou knowest,

Lend less than thou owest,

Ride more than thou goest,

Learn more than thou trowest

THE FOOL

W. SHAKESPEARE: King Lear

Schon seit langer Zeit werden Methoden der klassischen Mechanik zur Beschreibung von Quantenphänomenen eingesetzt. Ein nicht nur historisch äußerst wichtiges Beispiel hierfür ist die RUTHERFORD-Streuung; sowohl die Quantentheorie, als auch die klassische Dynamik und die niedrigste BORNSche Näherung liefern denselben differentiellen Streuquerschnitt, solange man den Vorgang in drei räumlichen Dimensionen betrachtet. Aufgrund der Drehimpulserhaltung verlaufen die klassischen Trajektorien in Ebenen, so daß auch eine Untersuchung des zweidimensionalen Streuproblems sinnvoll ist. Hier liegen die Dinge anders; während die Wahrscheinlichkeiten, in eine bestimmte Richtung gestreut zu werden, in der Quantenmechanik und der klassischen Dynamik für verschwindende Gesamtenergie ineinander übergehen, gibt die BORNSche Näherung gute Resultate für hohe Energien, siehe [155] und die darin angegebene Literatur.

Dies ist nur ein, wenn auch wichtiges Beispiel, das zeigt, daß das Interesse am semiklassischen Grenzfall ungebrochen war und auch im vollen Bewußtsein der Tatsache, daß die im Mikrokosmos auftretenden Phänomene der Erklärung und Beschreibung im Rahmen der Quantentheorie bedürfen, aufgrund vielfältiger Fortschritte in neuerer Zeit geradezu eine Renaissance erlebt. Als eine Hauptursache hierfür ist zuerst das deterministische Chaos zu nennen, wo man sich z.B. für den Übergang der linearen Dynamik der Wellen auf diejenige der Wellenfronten interessiert, die möglicherweise nichtlinear ist. Dies ist mit vielschichtigen Effekten verbunden und wird immer noch intensiv erforscht, wobei sich die auf semiklassischem Weg hergeleitete Spurformel [31] zur Berechnung von Fluktuationen in der Niveaudichte besonders bewährt hat.

Darüberhinaus konnten durch experimentelle Entwicklungen wie etwa die Ra-

stermikroskopie oder die Atomoptik [2] Möglichkeiten geschaffen werden, gezielte Eingriffe in Quantensystemen vorzunehmen oder sich sogar solche Systeme maßzuschneidern. Deren Dynamik sowie die Eigenschaften etwa von Atom-Clustern wurden und werden nicht zuletzt unter Zuhilfenahme semiklassischer Theorie erfolgreich untersucht [31]. Auch wurde z.B. das Tunneln ganzer Atome schon beobachtet [24]. Unter dem Stichwort „*Nanoscience*“ entwickelt sich dieses — durchaus interdisziplinäre — Forschungsgebiet dynamisch weiter, woran auch Standardmethoden der Semiklassik im Limes niedriger Energien beitragen, siehe z.B. [194]. Erfolge in der Quantenoptik machten es möglich, aus atomaren Gasen kohärente Vielteilchen-Ensembles, etwa sog. BOSE-EINSTEIN-Kondensate zu bilden. Sie dienen schon heute als Basis vielfältiger Experimente von zum Teil fundamentalem Charakter; der geeignete theoretische Rahmen zu deren Beschreibung ist oft die Semiklassik.

Weiter finden semiklassische Methoden etwa auch in der Quantenkosmologie [11], [98] und der Quantenfeldtheorie [113] Anwendung.

Die Dynamik physikalischer Systeme wird in der von SCHRÖDINGER stammenden Formulierung der Quantentheorie durch Wellen beschrieben. Sobald man ein nicht konstantes Potential und damit ein Bezugssystem gewählt hat, sind durch die lokale Wellenlänge $\lambda(x)$ und die Ableitung des Potentials zwei Längenskalen gegeben. Als Näherung an die exakte ist die sogenannte WKB-Wellenfunktion geeignet, wenn $\frac{m\lambda^3|V'(x)|}{2\pi\hbar^2} \ll 1$ gilt. Das System befindet sich dann im sogenannten semiklassischen Limes, wenn diese Bedingung außer in der unmittelbaren Umgebung der klassischen Umkehrpunkte erfüllt ist, und wir darüberhinaus die üblichen Zuordnungsregeln benutzen können, die im **ersten Kapitel** diskutiert werden. Unser Hauptinteresse gilt jedoch den Situationen langer Wellen, in denen dies in der Regel nicht der Fall ist; wir sprechen dann vom antiklassischen Limes, weil hier in der SCHRÖDINGER-Gleichung die Wellenzahl $|K(x)| = |P(x)|/\hbar$ in großen Gebieten klein wird, so daß die übliche singuläre Störungstheorie, in der man \hbar als kleinen Entwicklungsparameter betrachtet, nicht anwendbar ist, d.h. hier versagen die herkömmlichen semiklassischen Methoden. *Trotzdem ist es gerade ein wesentliches Ziel der vorliegenden Arbeit, zu zeigen, daß einfache Theorien, die man als Verallgemeinerung der üblichen Semiklassik betrachten kann, auch in diesem, extrem von der Quantenmechanik dominierten Bereich mit sehr großem Erfolg angewandt werden können.* Zur Formulierung der Randbedingungen und damit zur Definition der Reflexions- und Transmissionsamplituden sind die WKB-Funktionen jedoch möglicherweise sehr wohl geeignet und dann sogar wesentlich allgemeiner als der übliche auf ebenen Wellen basierende Zugang, was uns die Diskussion bestimmter wichtiger Potentialklassen erst ermöglicht. Wir benutzen die in den verallgemeinerten Anschlußbedingungen auftretenden Phasen und Amplituden zur Parametrisierung der Transmission und geben für spezielle Potentialformen Näherungen an. Alle weiteren Kapitel bauen auf diesem ersten auf, können dann aber prinzipiell unabhängig voneinander gelesen werden.

Das **zweite Kapitel** beschäftigt sich mit der semiklassischen Beschreibung des Tunnelns durch eine Barriere im Grenzfall kleiner Energien. Hierzu werden wir Methoden, die auf den verallgemeinerten Anschlußformeln und exakt lösbar Vergleichspotentialen basieren, beschreiben und anwenden.

Im **dritten Kapitel** wenden wir die beim Tunneln vorgestellten Konzepte auf die klassisch verbotene Reflexion über einer Potentialstufe an und vergleichen sie wieder mit numerisch exakten Resultaten.

Wir haben insbesondere versucht, für die oben geschilderten Situationen Näherungen im Sinne der WKB-Methode bereitzustellen, d.h. sie sollten nur von der Topologie der Bahnen und dem entsprechenden Wirkungsintegral abhängen und damit möglichst allgemein sein, während man auf weitere, vom jeweiligen Potential abhängige Größen verzichten kann. Schon im letzten Abschnitt dieses Kapitels haben wir jedoch für die praktisch wichtigen Potentialschwänze $\propto -r^{-n}$ das Niederenergie-Verhalten der Reflexionswahrscheinlichkeit untersucht; und im gesamten Rest der Arbeit werden wir uns auf spezielle Potentialformen konzentrieren.

Das **vierte Kapitel** beschäftigt sich mit der Reflexionsphase für eine Überlagerung aus homogenen Potentialschwänzen. Für spezielle Kombinationen sind die allgemeinen Lösungen bekannt; daraus kann man dann die entsprechenden Größen berechnen. Eingesetzt in eine phasenkorrigierte BOHR-SOMMERFELD-Quantisierungsregel bekommt man modifizierte Werte für die Energieniveaus bzw. Niveaudichten. Bis jetzt haben wir nur Potentiale untersucht, deren attraktive Schwänze asymptotisch schneller als r^{-2} verschwinden. In den physikalisch relevanten Situationen, in denen das Potential insgesamt nach unten beschränkt ist, konvergieren die entsprechenden Wirkungsintegrale für $E \rightarrow 0$, daher existieren höchstens endlich viele gebundene Zustände. All das ändert sich, wenn man Potentiale der Asymptotik $\propto r^{-2}$ betrachtet, was wir im **fünften Kapitel** tun wollen. Hier interessieren wir uns speziell für Überlagerungen von singulären Potentialen $\propto r^{-s}$, $s > 2$ mit dem langreichweitigeren $\propto r^{-2}$ -Anteil. Wir beschreiben gebundene Zustände für einen attraktiven Schwanz und Tunneln durch die Zentrifugalbarriere für einen repulsiven. Daß sich bei den gebundenen Zuständen im Falle ausreichender Potentialstärke eine Dipolserie ergibt, ist *a priori* klar; wir berechnen hier die absolute Lage der unendlich vielen schwelennahen Zustände, für die andere analytische Methoden versagen, und zeigen die Konvergenz der Serien mittels numerischer Daten. Beim Tunneln durch die Zentrifugalbarriere vergleichen wir mit der bekannten WKB-Penetrabilität, für die wir hier auch eine vereinfachte, und doch verbesserte Formel angeben. Trotzdem wird sich durch den Vergleich mit dem hier analytisch berechneten exakten Schwellenverhalten zeigen, daß man zwar (unter Benutzung der sog. LANGER-Modifikation) die Energieabhängigkeit der Schwellentransmission in WKB-Näherung richtig erhält, diese aber speziell im wichtigen Fall kleiner Drehimpulse beträchtliche Fehler aufweist.

Schließlich folgt eine **Zusammenfassung** dieser Arbeit.

Gerade durch die zunehmende Verfügbarkeit von Computer-Kalkulationsprogrammen gewinnen analytische Methoden wieder an Bedeutung, die Durchführung entsprechender Berechnungen wird so stark erleichtert oder überhaupt erst zumutbar; für die auftretenden speziellen Funktionen können die entsprechenden Werte in der Regel schnell, unkompliziert und mit beliebiger Genauigkeit ermittelt werden. Durch die Benutzung einfacher Ausdrücke für verschiedene Quantenphänomene, die leicht zu implementieren sind, kann man sich schnell Näherungswerte bzw. die entsprechenden Abhängigkeiten verschaffen. Es ist klar, daß die numerische Lösung der eindimensionalen SCHRÖDINGER-Gleichung, wenn auch nicht immer einfach, so letztlich doch nur eine Frage des Aufwands ist. Dies stand nicht im Mittelpunkt der vorliegenden Arbeit, obwohl wir uns schwerpunktmäßig gerade mit Situationen beschäftigt haben, wo numerische Lösungen vergleichsweise schwierig zu ermitteln sind, was dem Wert der erhaltenen Formeln zuträglich sein dürfte. Derartige numerische Resultate dienen fast ausschließlich nur dazu, die Güte der analytischen Ausdrücke zu ermitteln und gegebenenfalls deren Interpretation zu erleichtern.

Da analytische Methoden und Resultate gerade den zentralen Kern der Arbeit bilden, habe ich es nicht als sinnvoll empfunden, diese in Anhänge zu verbannen. Die hier behandelte Thematik ist bezüglich des mathematischen Apparates, der notwendig ist, um Ergebnisse zu erzielen, die besser als längst bekannte sind, etwas inhomogen. Dies, der fundamentale Charakter und die damit zusammenhängende lange Tradition an den untersuchten Fragestellungen sind wohl Gründe dafür, daß die Literatur hierzu erheblichen Ausmaßes ist. Trotzdem habe ich auch an den Stellen, die für uns nur von peripherem Interesse waren, ebenfalls das eine oder andere Zitat gebracht; auch wenn die Auswahl manchmal eher willkürlich als kritisch sein mag, dienen sie hier einer gewissen Abrundung, und einem interessierten Leser mögen sie als Ausgangspunkt eigener Überlegungen nützen. Meiner Meinung nach wird so der Wert der Arbeit ohne großen Aufwand erhöht; jedoch muß klar sein, daß der wesentliche Aspekt *hier* die Informations- und weniger die Wissensvermittlung sein kann. Wo ich es als möglich und angemessen empfand, wurden grundsätzlich elementarere und allgemeinere Darstellungen, wie man sie z.B. häufig im *American Journal of Physics* oder ähnlichen Zeitschriften findet, bevorzugt.

Weiter wollte ich auf Situationen hinweisen, wo der Einsatz ähnlicher wie der hier vorgestellten Methoden vielversprechende Chancen auf Fortschritt erkennen lassen, beispielsweise etwa die Verwendung der säkularen Störungsrechnung bei inhomogenen Potentialschwänzen, der semiklassischen Quantisierung von Resonanzen, die Energieaufspaltung in der Doppelmulde, der Anwendung der modifizierten Anschlußregeln in der Mesonen-Spektroskopie, einer weiteren Verallgemeinerung der schwelennahen Quantisierung in einem größeren Energiebereich, eine etwaige dem SEATON-Theorem mehr oder weniger analoge Beziehung für Potentiale $\propto -r^{-2}$ (für $r \rightarrow \infty$) oder die Benutzung der Transmissionsformel (5.38) bei niedrigen

Drehimpulsen. All dies sind Themen, die gerade auch in jüngster Zeit von erheblichem Interesse sind.

Obwohl die vorliegende Darstellung grundsätzlich keine Vorkenntnisse auf diesem Gebiet voraussetzt und auch anders vorgeht, sei wegen der oben erwähnten Inhomogenität und evtl. als Ergänzung trotzdem auf die Darstellungen etwa von BRACK und BHADURI [31], CHILD [48], FRÖMAN und FRÖMAN [79], MASLOV und FEDORJUK [141] oder die von GUTZWILLER [95] angegebene Literatur hingewiesen.

Der Vollständigkeit halber sei noch erwähnt, daß bei konkreten Rechnungen in dieser Arbeit das HARTREE-System, also $\hbar = m = 1$ („atomare Einheiten“), benutzt wurde und wir in Einklang mit dem allgemeinen Sprachgebrauch die potentielle Energie meist als „Potential“ bezeichnen. Die LANDAU-Symbole sollten nicht zu streng interpretiert werden; sie wurden manchmal auch eher informativ eingesetzt.

Kapitel 1

Die semiklassische Wellenfunktion

What all this means is that the WKB approximation is probably a very good idea since so many have rediscovered it in a wide variety of disciplines.

W.H. HOLMES: Introduction to Perturbation Methods

Die mathematischen Formulierungen der klassischen Physik und der Quantenmechanik bedingen sich gegenseitig, was aber die Zusammenhänge dieser Theorien nicht immer einfach zu durchschauen macht. Verschiedene Näherungsmethoden und sog. Korrespondenzprinzipien, deren gegenseitiges Wechselspiel teilweise ebenfalls nur schwer zu überblicken ist, resultieren aus dieser Tatsache. Inwieweit letztendlich einige — auch heute noch diskutierte — Interpretationsprobleme der Quantentheorie „nur“ eine Manifestation der ungenügenden Kenntnis dieses Übergangs darstellen, ist kaum zu sagen [101], [162]. Eine andere Folge ist der nicht immer einheitliche Sprachgebrauch in der betreffenden Literatur, was beispielsweise Begriffe wie „Korrespondenzprinzip“ oder „semiklassischer Grenzfall“ betrifft.

Dieses erste Kapitel gibt also zunächst einen Überblick über einige weitverbreitete semiklassische Methoden, behandelt dann die WKB-Wellenfunktionen und die Standard-Anschlußregeln, welche dann dadurch verallgemeinert werden, daß man Phasen und Amplituden zulässt, die von der speziellen Form des gerade betrachteten Potentials und der Energie abhängen, und von den Standardwerten abweichen können. Im Limes langer Wellen, in dem die herkömmliche semiklassische Theorie versagt, geben wir Näherungen für diese Größen an und parametrisieren damit das Tunnelproblem.

Wesentliche Teile dieses Kapitels wurden bereits in [64] veröffentlicht.

1.1 Der klassische Limes

Mit der RUTHERFORD-Streuung haben wir in der Einleitung schon ein System kennengelernt, das zeigt, daß der Übergang von der Quantentheorie auf die klassische Mechanik durchaus subtiler Natur sein kann. Zu sehen ist das auch z.B. an der Tatsache, daß das EHRENFEST-Theorem (siehe etwa [184]), welches besagt, daß sich die Erwartungswerte von Ort und Impuls eines Wellenpakets gemäß den klassischen Bewegungsgleichungen verhalten, sofern dessen Ausdehnung viel kleiner als die Änderungsskala des Potentials ist — gerade solche schmalen Wellenpakete verbreitern sich jedoch normalerweise am schnellsten — und man den Erwartungswert der Kraft durch die Kraft am Erwartungswert des Ortes ersetzen kann, weder notwendig noch hinreichend zur Definition des klassischen Grenzfalles ist. Daß es nicht hinreichend ist, sieht man einfach am Harmonischen Oszillator, für den das EHRENFEST-Theorem zwar exakt gilt (und, bemerkenswerter Weise, auch die BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung; ebenfalls exakt ist hier die semiklassische Näherung des Propagators [104] und darüberhinaus erfolgt in diesem System die zeitliche Entwicklung der WIGNERSchen Phasenraumdichte exakt nach der klassischen LIOUVILLE-Gleichung), jedoch sind die Unterschiede zwischen klassischer und Quantendynamik auch in diesem System natürlich nicht von der Hand zu weisen, gerade sie waren ja ausschlaggebend für die Entdeckung des Wirkungsquantums h . Daß es nicht notwendig ist, ist schwieriger zu sehen; dazu muß das EHRENFEST-Theorem verletzt sein, obwohl sich das System typisch klassisch verhält. Hierzu stellt man zunächst fest, daß es sinnvoll ist, die jeweiligen Phasenraumdichten und Erwartungswerte, bzw. deren Evolution, zu vergleichen. Da sich nicht einmal der Erwartungswert des Impulses eines klassischen Ensembles zwingend gemäß den NEWTONSchen Bewegungsgleichungen entwickelt, kann man einfache Beispiele konstruieren, die die Behauptung beweisen [15].

Das sogenannte Korrespondenzprinzip ist ein weiterer Kandidat zur Beschreibung des klassischen Grenzfalles der Quantentheorie. Hiervon gibt es mehrere verschiedene Versionen; welche nach PLANCK ($h \rightarrow 0$) bzw. BOHR (Limes großer Quantenzahlen $n \gg 1$) benannt sind [130]. Genauer teilt sich das BOHRsche Prinzip noch einmal in die sogenannte Frequenz- bzw. Formkorrespondenz auf: erstere liegt vor, wenn das Quantenfrequenzspektrum eines periodischen Systems im Limes großer n in das klassische Frequenzspektrum übergeht; letztere besagt, daß in diesem Grenzfall die Frequenzen dieselbe funktionale Abhängigkeit der Energie besitzen. Anhand einfacher Systeme, wie etwa dem starren Rotator, hat LIBOFF gezeigt, daß die Grenzwertbildung $h \rightarrow 0$ in der Regel nicht gleichbedeutend mit $n \rightarrow \infty$ ist [130].

Ein Beispiel für die BOHRsche Version des Korrespondenzprinzips haben wir schon in der Einleitung bei der RUTHERFORD-Streuung gesehen; beim dortigen COULOMB-Problem wurde bei $E = 0$ Übereinstimmung zwischen klassischer und Quantenmechanik gefunden. Danach soll auch die Niveaudichte proportional zur

klassischen Periodendauer bei der betreffenden Energie sein, $dE/dn = h\nu$, und wegen der Energieabhängigkeit der Wirkung S , $dE/dS = \nu$ wird¹ $dS/dn = h$, was den Zusammenhang zur semiklassischen Quantisierung herstellt. Dies versagt jedoch, wenn der Schwanz des Potentials mit einer zu starken negativen Potenz abfällt. Für einen hinreichend attraktiven r^{-2} -Schwanz kann man die Situation noch durch eine sogenannte LANGER-Modifikation retten [121], wenn die Potenz kleiner als -2 ist, wird jedoch die Zustandsdichte bei $E \rightarrow 0$ proportional zu $E^{-1/2}$. Die Anwendbarkeit der BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung für tiefe Potentiale mit attraktiven, singulären Schwänzen (die für $r \rightarrow \infty$ schneller als $\propto r^{-2}$ verschwinden) wird noch immer kontrovers interpretiert [88], nach unserem Dafürhalten kann sie bei hinreichend negativen Energien durchaus benutzt werden. Vergrößert man die Potentialstärke des attraktiven Schwanzes, so entstehen immer mehr gebundene Zustände, d.h. bei fester negativer Energie steigt die Quantenzahl an und die BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung verbessert sich dann. Hingegen ist klar, daß sie bei festem Potential für $E \rightarrow 0$ schlechter wird, im Gegensatz etwa zur COULOMB-Wechselwirkung, wo die Quantenzahlen bei $E \rightarrow 0$ beliebig anwachsen. Wir werden aber im fünften Kapitel anhand der unendlichen Dipolserien auch sehen, daß sich bei festem Potential die BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung gerade für sehr große Quantenzahlen n verschlechtern kann. Einige Autoren haben bemerkt, daß jeder der beiden Grenzwerte $h \rightarrow 0$, $n \rightarrow \infty$ für sich genommen unphysikalische Resultate liefert, wenn man damit etwa in die Formeln für die Energieniveaus des Harmonischen Oszillators oder eines Teilchens im Kasten eingeht ($E_n \equiv 0$ bzw. $E_n \rightarrow \infty$). Daher wird heute manchmal auch eine Kombination aus beiden Korrespondenzprinzipien benutzt; $h \rightarrow 0$, $n \rightarrow \infty$ und $hn = S = \text{const.}$, wo S die entsprechende klassische Wirkung ist, siehe [99],[132] und die darin angegebene Literatur.

In der HASENÖHRLschen semiklassischen Quantisierungsbedingung tritt additiv zur ganzen Quantenzahl n eine weitere Größe α auf, die von der speziellen Situation abhängt. Sie muß experimentell bestimmt werden und entzieht sich in der Regel einer Ermittlung durch das Korrespondenzprinzip, was historisch ein wesentliches Defizit der alten Quantentheorie war [187]. Sogenannte Konfigurationskorrespondenz liegt vor, wenn die zeitliche klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Mittel mit der quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsdichte im Limes großer Quantenzahlen übereinstimmt, was speziell für Zustände des Harmonischen Oszillators ein beliebtes Lehrbuchbeispiel ist. Jedoch vergleicht man hier zwei konzeptionell verschiedene Größen; einen oszillierenden klassischen mit einem stationären Quantenzustand und eine klassische Wahrscheinlichkeitsinterpretation, die man durch genaue Wahl der Anfangsbedingungen, d.h. durch die Auswahl einer konkreten Trajektorie, umgehen kann, mit einer nicht zu umgehenden quantenmechanischen (obgleich man mit Hilfe der WKB-Funktionen leicht zeigen kann, daß

¹Es war diese Beziehung, an die HEISENBERG bei der Formulierung der ersten konsistenten Quantentheorie anknüpfte.

dem Erwartungswert eines ortsabhängigen Operators im Limes räumlich rasch oszillierender, stationärer Wellen der zeitliche Mittelwert entspricht). Durch konsequente Betrachtung von Ensembles läßt sich diese Problematik nicht nur beheben; die Korrespondenz wird sogar verbessert [128]. Weitere kritische Bemerkungen zum $n \rightarrow \infty$ -Korrespondenzprinzip findet man beispielsweise in [187]. Zusätzlich existiert noch die sog. HEISENBERGSche Version eines Korrespondenzprinzips: die Quantenmatrixelemente eines Operators \hat{A} werden hier mit der FOURIER-Komponente von A der entsprechenden klassischen Bewegung assoziiert. DE PRUNELÉ hat gezeigt, daß es hierzu nicht ausreicht, wenn nur die beteiligten Quantenzahlen groß, aber ihre Differenzen klein sind; er findet, daß darüberhinaus der Operator selbst im Skalarprodukt das klassisch verbotene Gebiet nicht merklich gewichten darf [56].

Speziell im Zusammenhang mit der Chaostheorie ist das Korrespondenzprinzip noch immer Gegenstand einer zum Teil kontroversen Diskussion siehe etwa [16], [122]. Gewissermaßen ein Extrem der PLANCKSchen Version ist die Darstellung der klassischen Mechanik als Quantentheorie mit infinitesimalem \hbar im Rahmen der Nonstandard-Analysis [208]; über den Limes $\hbar \rightarrow 0$ hängen auch die POISSON-Klammern der klassischen Mechanik mit den Vertauschungsrelationen der Quantentheorie zusammen.

Setzt man $\Psi = A(\vec{x}, t) \exp\left[i\frac{S(\vec{x}, t)}{\hbar}\right]$ in die SCHRÖDINGER-Gleichung ein, so erhält man die Kontinuitätsgleichung und eine HAMILTON-JACOBI-Gleichung, in der zusätzlich zum normalen ein sogenanntes Quantenpotential auftritt. Dieses Quantenpotential hängt von der Wellenfunktion ab, und für ein *freies* Teilchen stellt sich heraus, daß es im PLANCKSchen Limes $\hbar \rightarrow 0$ verschwindet, d.h. der klassische Grenzfall umso besser erfüllt ist, je breiter die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Ortsraum verteilt ist. Jedoch versagt diese Art des Grenzübergangs für die stehenden Wellen gebundener Zustände [14]. Der Begriff „semiklassische Wellenfunktion“ wird beispielsweise benutzt, wenn das korrespondierende Quantenpotential identisch verschwindet [157], eine Sprachregelung, der wir uns nicht anschließen werden.

Auf natürliche Weise kann der klassische Limes durch die Pfadintegral-Formulierung der Quantenmechanik von FEYNMAN untersucht werden. Hier macht man sich die Korrespondenz von klassischer und quantaler Evolution für kleine Zeiten zur Berechnung des Propagators zunutze. Betrachtet man im Pfadintegral-Formalismus den Grenzfall² $1 \ll S/\hbar$, dann ist der auftretende Exponent stark oszillierend, so daß sich die Beiträge benachbarter Bahnen gegenseitig gemäß dem Lemma von RIEMANN-LEBESGUE aufheben, außer entlang den klassischen Trajektorien, wo $\delta S = 0$ gilt (dies ist ein wesentlicher Schritt beim Übergang einer Theorie des Wellenfeldes zu einer der Teilchenbahnen; eine hierzu interessante Diskussion findet man etwa in [179]). In bestimmten Situationen können aber Bah-

²Der PLANCKSche Limes $\hbar \rightarrow 0$ ist also so zu interpretieren, daß alle relevanten Wirkungen S viel größer als \hbar sind, wodurch sehr viele Phasenraumzellen zur betreffenden Dynamik beitragen.

nen wichtig werden, die es klassisch nicht gibt [27], [151], auch kann sich aufgrund von Quanteneffekten die „klassische“ Bahn selbst ändern [102]. Interferenzen zwischen den Trajektorien können Strukturen liefern, die in obigem Limes $1 \ll S/\hbar$ sehr fein werden. Während beispielsweise der differentielle Streuquerschnitt in der klassischen Mechanik oft eine nur schwach veränderliche Funktion des Winkels ist, kann es sein, daß der korrespondierende quantenmechanische stark oszilliert. Über ein kleines Intervall gemittelt stimmen beide dann recht gut überein, jedoch ist es möglich, daß das quantenmechanische Resultat nicht einmal punktweise gegen das klassische konvergiert, so daß die Vertauschung von Grenzwerten problematisch werden kann.

Berücksichtigt man nur Terme bis in zweiter Ordnung der Bahnvariation δx , so wird der Propagator formal identisch zur WKB-Approximation und die Hauptbeiträge zum Pfadintegral rühren von Bahnen her, die den klassischen Bewegungsgleichungen genügen [104]. Prozesse, die klassisch verboten sind, und die uns hier besonders interessieren, werden dann jedoch häufig unter Zuhilfenahme komplexer Zeiten oder Umkehrpunkte untersucht [105], [106] und [143].

„*Controversy surrounds the semiclassical limit*“ [101]. Obwohl hier einige Aspekte des Übergangs beider Theorien noch nicht einmal erwähnt wurden (beispielsweise Themen im Zusammenhang mit der Bestimmung der Niveaudichte mittels der Spurformel bei hohen Energien [101], WIGNER-, HUSIMI- oder andere Phasenraumdichten [199], die Quantisierung dissipativer Systeme [210] oder der Konstruktion kohärenter Zustände [53]), sollte diese Einführung doch genügend intellektuelles Unbehagen hervorgerufen haben, um zu zeigen, daß der semiklassische Grenzfall ein lohnender und spannender Gegenstand auch moderner Forschung sein kann und muß, wenn man die Gesetze und Phänomene sowohl des Mikrokosmos, als auch der klassischen Physik besser verstehen will. Die Literatur zu dieser äußerst interessanten Thematik ist immens; einen guten Startpunkt findet man z.B. in [95].

1.2 Herleitung der WKB-Wellenfunktion

In den folgenden Abschnitten sollen Näherungen an die exakten Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung, die sogenannten WKB-Wellenfunktionen³ und die Stan-

³Benannt nach WENTZEL, KRAMERS und BRILLOUIN, die 1926 Arbeiten zu dieser Thematik publizierten; WENTZELS Herleitung der BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung ist nicht unumstritten [158], KRAMERS [123] beschäftigte sich mit der Linearisierung um den Umkehrpunkt und BRILLOUIN mit mehrdimensionalen Problemen. Die Wellenfunktion wurde in einer speziellen Form schon von CARLINI 1817 im Rahmen der Himmelsmechanik entwickelt; im Jahre 1837 entdeckten sie LIOUVILLE und GREEN unabhängig voneinander wieder. Nach Beiträgen von RAYLEIGH 1912 und GANS 1915 fand JEFFREYS 1924 die Standard-Anschlußbedingungen [78], [116], [160].

standard-Anschlußbedingungen, diskutiert werden. Seit den Anfängen der Quantentheorie liefern sie in den meisten Fällen verlässliche Resultate, wobei ein besonderer Vorteil dieser Methode darin besteht, daß der Formalismus normalerweise nur von der Topologie der klassischen Bahnen, nicht aber von der jeweils speziellen Form des Potentials abhängt. Ausgehend von den Grenzen dieser Theorie werden wir später deren Möglichkeiten in einigen physikalisch wichtigen Fällen entscheidend verbessern.

In der Literatur existiert eine Reihe von Herleitungen der schon oben kurz angesprochenen sogenannten WKB-Wellenfunktionen, siehe z.B. [13], [22], [104], [125], [150] und [186]. Die hier gewählte Variante [82] basiert auf der Methode der Vergleichspotentiale und dient zu deren Vorstellung, da wir sie später noch einige Male benutzen werden. Wie man weiß, sind die ebenen Wellen $\exp(\pm iKx)$ die Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung mit konstantem Potential. Dies legt für den allgemeinen Fall

$$\Psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\Psi(x) = 0, \quad (1.1)$$

für den man die exakten Lösungen normalerweise nicht kennt, folgenden Ansatz nahe (wobei wir hier Ψ für exakte und ψ für WKB-Wellenfunktionen schreiben):

$$\psi(x) = [\tilde{S}'(x)]^{-\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\tilde{S}(x)\right], \quad (1.2)$$

was auf eine Gleichung für \tilde{S} führt:

$$[\tilde{S}'(x)]^2 - \hbar^2[\tilde{S}'(x)]^{\frac{1}{2}} \frac{d^2}{dx^2}[\tilde{S}'(x)]^{-\frac{1}{2}} = 2m[E - V(x)] =: \hbar^2 K^2(x), \quad (1.3)$$

wo $K(x) = \frac{P(x)}{\hbar}$ die lokale Wellenzahl ist. Eine exakte Lösung dieser Gleichung wäre gleichwertig mit einer des ursprünglichen Problems (1.1). Der Ansatz

$$\tilde{S}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \hbar^{2n} S_n(x) \quad (1.4)$$

liefert nach Einsetzen in (1.3) und anschließendem Koeffizientenvergleich für die Potenzen von \hbar in den niedrigsten Näherungen folgende Gleichungen; die erste ist die zeitfreie HAMILTON-JACOBI-Gleichung der Mechanik bzw. entspricht der eigentlichen Eikonalgleichung der geometrischen Optik [185]:

$$(S_0')^2 = \hbar^2 K^2(x) \text{ und } 2S_0'S_1' - [S_0']^{\frac{1}{2}} \frac{d^2}{dx^2}[S_0']^{-\frac{1}{2}} = 0 \quad (1.5)$$

mit den Lösungen (obgleich es für die Arbeit nicht von wesentlichem Interesse sein wird, vereinbaren wir, daß K die positive reelle bzw. imaginäre Wurzel sein soll):

$$S_0(x) = \pm \hbar \int^x dx' K(x') \quad (1.6)$$

und

$$S_1(x) = \pm \frac{1}{2} \int^x dx' [K(x')]^{-\frac{1}{2}} \frac{d^2}{dx'^2} [K(x')]^{-\frac{1}{2}}. \quad (1.7)$$

Im Limes $\hbar \rightarrow 0$ sollte $S(x) := S_0(x)$ dominieren, und man erhält so die WKB-Wellenfunktionen: oszillierend

$$\psi(x) \propto \frac{1}{\sqrt{K(x)}} \exp \left[\pm i \int^x dx' K(x') \right], \quad (1.8)$$

wenn $P(x) = \hbar K(x)$ reell ist, d.h. im klassisch erlaubten Gebiet, und exponentiell gedämpft bzw. ansteigend

$$\psi(x) \propto \frac{1}{\sqrt{|K(x)|}} \exp \left[\pm \int^x dx' |K(x')| \right] \quad (1.9)$$

außerhalb.

Die Vernachlässigung der höheren Terme $S_n, n > 0$ ist natürlich gleichwertig mit der Vernachlässigung der SCHWARZschen Ableitung in Gleichung (1.3)

$$\hbar^2 [\tilde{S}'(x)]^{\frac{1}{2}} \frac{d^2}{dx^2} [\tilde{S}'(x)]^{-\frac{1}{2}} = \hbar^2 \left[\frac{3}{4} \frac{\tilde{S}''^2}{(\tilde{S}')^2} - \frac{1}{2} \frac{\tilde{S}'''}{\tilde{S}'} \right]; \quad (1.10)$$

sie können unter Zuhilfenahme weiterer Näherungsverfahren, z.B. [17], [23], [100] und [136] einbezogen werden, jedoch sollte man beachten, daß die *asymptotische* Entwicklung (1.4) normalerweise nicht konvergent ist, so daß die Mitnahme hoher Terme das Ergebnis sogar verschlechtern kann [17], [149], wie dies bei Störungsentwicklungen oft der Fall ist.

Der Nenner $\sqrt{|K|}$ ist ein Hinweis darauf, daß die WKB-Wellenfunktionen zumindest in der unmittelbaren Nähe eines klassischen Umkehrpunktes $P(x_U) = K(x_U) = 0$ keine brauchbaren Resultate liefern werden. Es erhebt sich die Frage, in welchen Energie- oder Raumgebieten man die WKB-Wellenfunktionen sinnvoll anwenden kann. Durch Einsetzen der Näherung (1.8) in die SCHRÖDINGER-Gleichung (1.1) erhält man unter Beachtung der Tatsache, daß alle Zusatzterme viel kleiner als K^2 sein sollen:

$$\left| \frac{3}{4} \frac{K'(x)^2}{K(x)^4} - \frac{1}{2} \frac{K''(x)}{K(x)^3} \right| \ll 1. \quad (1.11)$$

Der erste Term ist sicher klein gegen 1, wenn $|dK^{-1}/dx| \ll 1$, d.h. wenn sich die *lokale DE BROGLIE-Wellenlänge* $\lambda := 2\pi/K$ räumlich nur *langsam ändert*. Diese vereinfachte Bedingung wird in vielen Lehrbüchern, die die WKB-Theorie behandeln, angegeben; die Tatsache, daß wir ein konstantes Potential als Vergleichspotential gewählt haben, macht sie naheliegend. Trotzdem ist sie strenggenommen

weder hinreichend noch notwendig dafür, daß WKB eine gute Näherung ist⁴. Es stellt sich heraus, daß die WKB-Funktionen sogar für lange Wellen außer in der unmittelbaren Umgebung der Umkehrpunkte gute Näherungen sein können, und selbst für z.B. singuläre Potentiale ist es möglich, daß sie in der Nähe der Singularität anwendbar sind.

Leitet man die WKB-Wellenfunktionen zweimal ausschließlich nach dem im Exponenten auftretenden x ab, so sehen wir, daß eine *derartig berechnete* zweite Ableitung die SCHRÖDINGER-Gleichung exakt lösen würde. Dies kann man so interpretieren: In den Bereichen, wo WKB gut ist, reicht es, die Amplitude (d.h. die Einhüllende im klassisch erlaubten Gebiet) als näherungsweise konstant anzusehen, den wesentlichen Teil der x -Abhängigkeit der Wellenfunktion beinhaltet die Phase, was wir hin und wieder benutzen werden. Die WKB-Wellenfunktionen (1.8) sind damit näherungsweise Eigenfunktionen des Impulsoperators, man kann sie also *eindeutig* nach den Ausbreitungsrichtungen zerlegen.

Trotzdem kommt gerade auch dieser Amplitude in der WKB-Wellenfunktion eine zentrale Bedeutung zu: Schreibt man nämlich die WKB-Wellenfunktion in der Form $\psi = a(x) \exp[i \cdot s(x)]$, so wird die Stromdichte $J := \frac{\hbar}{m} \Im(\psi^* \frac{d}{dx} \psi) = \frac{a^2}{m} \frac{d}{dx} s = \text{const.}$, weswegen also für WKB-Funktionen die Kontinuitätsgleichung gilt. Dies zeigt die Wichtigkeit des Faktors $a = \frac{1}{\sqrt{K}}$. Sein Pendant in mehreren Dimensionen, die Wurzel aus der sogenannten VAN-VLECK-Determinante, divergiert gerade an den Punkten, an denen die Welle fokussiert wird.

In der Quantenmechanik sind nun oft Fälle von Interesse, wo die Wellenfunktion einen oder mehrere klassische Umkehrpunkte x_U überqueren muß; man denke etwa an die Streuung an einem Potential, gebundene Zustände oder Situationen, bei denen Tunneln wichtig ist. Da aber die WKB-Funktionen bei x_U divergieren, stellt sich die Frage, wie man die Informationen der Randbedingungen, die, wie in den obigen Beispielen oft ja wesentlich sind, auf die andere Seite des Umkehrpunktes bringt, d.h. präziser, wie man die WKB-Wellenfunktionen über den Umkehrpunkt hinweg fortsetzt.

1.3 Die Anschlußregeln

Ein klassischer Umkehrpunkt ist gegeben durch $P^2(x_U) = 0$, seine Ordnung ist definiert durch den Grad der Nullstelle der kinetischen Energie bei x_U . Am einfachsten und in den Anwendungen am häufigsten auftretend ist wohl ein sogenannter

⁴Daß sie nicht notwendig ist, sieht man am Fall eines Potentials $\propto r^{-4}$ bei $E = 0$, für das die WKB-Wellenfunktionen exakte Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung sind, obwohl die vereinfachte Bedingung für $r \rightarrow \infty$ stark verletzt ist. Daß sie nicht hinreichend ist, sieht man am Beispiel $K(x) = [C_1 + C_2 \omega^{-3/2} \cdot \sin(\omega x)]^{-1/2}$. Hier wird die vereinfachte Bedingung für steigende ω zwar immer besser erfüllt, der zweite Term in (1.11) oszilliert aber dann mit einer Amplitude, die mit großen ω beliebig anwächst.

linearer Umkehrpunkt x_U , für den dann gilt:

$$x \approx x_U \Rightarrow \frac{P^2(x)}{\hbar^2} = K^2(x) = \text{const.} \cdot (x - x_U) + o[(x - x_U)], \quad (1.12)$$

er trennt das klassisch erlaubte Gebiet ($P^2 > 0$) vom verbotenen ($P^2 < 0$). Wie wir gesehen haben, versagt die WKB-Näherung in der direkten Umgebung von x_U , während sie etwas weiter weg davon eine sehr präzise Approximation der Wellenfunktion sein kann. Handelt es sich nun um einen linearen Umkehrpunkt, so kann man in seiner Nähe statt der exakten SCHRÖDINGER-Gleichung die entsprechende linearisierte lösen, was am einfachsten in Impulsdarstellung geschieht; die entsprechenden Eigenfunktionen sind die sogenannten AIRY-Funktionen [1]. Sinnvoll ist dies nur in der Umgebung von x_U , in der das vernachlässigte Restglied der Entwicklung auch tatsächlich viel kleiner ist als der berücksichtigte lineare Term. Diese Lösungen sind fortzusetzen, bis die WKB-Wellen gute Näherungen sind, und dann an diese asymptotisch anzupassen, d.h. die AIRY-Funktionen müssen dort durch ihre asymptotische Form schon gut beschrieben werden können. Damit die Linearisierung verlässliche Resultate liefert, muß also das Potential bis über den Bereich hinaus, wo die WKB-Wellen versagen, in guter Näherung linearisierbar sein; zusätzlich müssen sich die AIRY-Funktionen in diesem Übergangsbereich schon in ihrer Asymptotik befinden. Eine andere Art der Herleitung bedient sich ebenfalls der Linearisierung des Potentials, umgeht den Umkehrpunkt aber in der komplexen Ebene [125]. Bis in die jüngste Vergangenheit werden die Herleitungen der Anschlußregeln („*connection formulae*“) zum Teil kontrovers diskutiert [80]. Häufig finden wir sie in folgender Form in der Literatur [22], [82], [145], [184]:

$$\frac{e^{-\left|\int_{x_U}^x K dx'\right|}}{\sqrt{|K|}} \rightarrow \frac{2 \cdot \cos\left(\left|\int_{x_U}^x K dx'\right| - \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{K}}, \quad (1.13)$$

der Pfeil gibt die Richtung der gestellten Randbedingung an: weit im klassisch verbotenen Bereich soll die Wellenfunktion verschwinden.

Die zweite Formel

$$\frac{\sin \eta \cdot e^{\left|\int_{x_U}^x K dx'\right|}}{\sqrt{|K|}} \leftarrow \frac{\cos\left(\left|\int_{x_U}^x K dx'\right| - \frac{\pi}{4} + \eta\right)}{\sqrt{K}} \quad (1.14)$$

beschreibt den Übergang einer oszillatorischen in eine exponentiell ansteigende (vom Umkehrpunkt x_U aus gesehen) Wellenfunktion. Ändert man nun in der ersten Anschlußregel die Phase nur leicht ab, so erzeugt dies jenseits des Umkehrpunktes eine exponentiell ansteigende Wellenfunktion. Wenn also η nicht verschwindet (genauer: dem Wert in der ersten Formel (1.13) entspricht, siehe unten), wird die abnehmende Welle von der anwachsenden verdeckt. Der Winkel η

ist ein Maß für die Mischung von abfallender und ansteigender Welle; allein aus der asymptotischen Form im klassisch verbotenen Gebiet, die von der anwachsenden Funktion dominiert wird, ist er normalerweise nicht zu bestimmen. Hierzu ist noch zu bemerken, daß die beiden Seiten der Zuordnungsvorschriften sich auf die asymptotische Form der Wellenfunktion $\Psi(x)$, nicht aber auf deren exakten numerischen Wert beziehen, d.h. die Phase der Wellenfunktion, die exponentiell verschwindet, ist nicht exakt $\left| \int_{x_U}^x K dx' \right| - \frac{\pi}{4}$, und die Wellenfunktion, die genau diese Phase hat, wird normalerweise auf der anderen Seite des Umkehrpunktes nicht exponentiell gegen Null gehen [22]. Daher ist eine bedenkenlose Anwendung der Formeln nur in Richtung der Pfeile möglich.

Diese Vorschriften geben nur die Zuordnung der entsprechenden Wellenfunktionen zueinander wieder, das grundsätzliche Versagen der WKB-Näherungen in der Nähe des klassischen Umkehrpunktes vermögen sie nicht zu beheben. Das ist jedoch z.B. mit sogenannten gleichmäßig gültigen Approximationen („*uniform approximations*“) durchaus möglich.

Sofort stellt sich auch hier die Frage nach Kriterien für die Gültigkeit dieser Formeln. Man kann erwarten, daß sie gelten, wenn sowohl die Wellenlängen im erlaubten Gebiet, als auch die Eindringtiefen klein gegen die klassischen Längenskalen des Problems werden [65], [88]. Dadurch, daß er das Restglied in der TAYLOR-Entwicklung des Potentials durch die zweite Ableitung abschätzt, gibt TROST [200] in seiner Dissertation, in der er sich ausschließlich mit der Phase in der ersten Anschlußregel (1.13) beschäftigt hat, dazu in den Abschnitten 1.2 und 2.2 die folgende Formel an:

$$|V''(x_U)| \ll C \cdot \left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^{1/3} |V'(x_U)|^{4/3}, \quad (1.15)$$

wobei er für C die beiden Werte 4 und $1/\pi$ anbietet mit der Bemerkung, „daß die Vorfaktoren in den Abschätzungen nicht zu ernst genommen werden sollten“.

Bei MESSIAH [145] findet man folgende Voraussetzungen: zunächst wird durch das Wirkungsintegral in Einheiten des Wirkungsquantums

$$\int_a^b dx |K| / 2\pi \quad (1.16)$$

die Anzahl der Wellenlängen (bzw. Eindringtiefen) im Intervall (a, b) definiert. Dann muß die kinetische Energie in einer Umgebung von x_U von mindestens einer, vorzugsweise aber mehrerer Wellenlängen in guter Näherung linearisierbar sein, und sich an jeder Seite an einen sich über mehrere Wellenlängen erstreckenden asymptotischen Bereich anschließen, in dem die WKB-Näherung gültig ist. Ein auf der Herleitung in der komplexen Ebene basierendes mathematisch relativ aufwendiges Kriterium wird von KEMBLE [118] gegeben, Fehlerschranken findet

man z.B. bei OLVER [160], der auch Arbeiten weiterer Autoren zu dieser Thematik angibt. Im konkreten Einzelfall werden solche quantitativen Kriterien jedoch oft außer Acht gelassen. Fehlerschranken für die auf diesen Anschlußregeln aufbauende herkömmliche BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung finden sich etwa in [43]. In letzter Zeit wurden sehr häufig Kombinationen aus Störungsrechnung und WKB-Methode [58], [134], [135], [166], [176] und [211] oder die sogenannte Supersymmetrische WKB-Quantisierung [61] diskutiert; hier ist es noch schwieriger, Fehlerschranken anzugeben.

Man kann vom *semiklassischen Grenzfall* sprechen, wenn die oben angegebene Anschlußregel (1.13) angewandt werden darf, dies ist oft für hohe Energien, d.h. kurze Wellen der Fall; jedoch verdienen z.B. Potentiale der Form $V(x) \propto x^{-\alpha}$, $0 < \alpha < 2$, besondere Beachtung; beispielsweise wird die Phase der im verbotenen Gebiet abnehmenden Wellenfunktion für $\alpha = 1$ und $E \rightarrow 0$: $\Phi = \pi/2$ [200], jedoch können (im Gegensatz zu stärker singulären Potentialen $\alpha > 2$) in der Nähe des Ursprungs die WKB-Näherung und demzufolge die erste Anschlußformel (1.13) nicht benutzt werden, was ein besonderes Licht auf die Erfolge der Semiklassik in derartigen Systemen wirft. Weiter ist zu beachten, daß wir bei der schon erwähnten RUTHERFORD-Streuung [155] nicht mit dieser Definition des semiklassischen Grenzfalles gearbeitet haben. Unsere Begriffsbildung impliziert übrigens keineswegs, daß die Observablen ihre korrespondierenden klassischen Werte im semiklassischen Limes annehmen; ein Beispiel hierfür ist der Tunnelprozess durch einen symmetrischen Potentialberg, wo für Energien, die kleiner als die des Gipfels sind, die klassische Transmission verschwindet, aber normalerweise die quantenmechanische Penetrabilität erst am Fuße der Barriere den klassischen Wert Null erreicht, obwohl die Standard-Anschlußbedingungen jedoch gerade nicht anwendbar sind; die semiklassische Tunnelwahrscheinlichkeit versagt daher, wie wir später noch ausführlich besprechen werden. Weil die Gültigkeit der Zuordnungsregeln eine lokale Eigenschaft ist, kann es darüberhinaus vorkommen, daß die Anwendung der herkömmlichen Anschlußregeln an einem Umkehrpunkt gerechtfertigt ist, an einem anderen jedoch nicht. Derartige Fälle werden wir untersuchen.

Als ein einfaches Beispiel wollen wir zunächst eine scharfe Potentialstufe der Höhe V_0 betrachten, sie hat den Vorteil, daß die WKB-Wellenfunktionen die exakten Lösungen des Problems sind. Daß die Linearisierung in der Nähe des Umkehrpunktes problematisch ist, liegt auf der Hand [151]. Das Potential ist also

$$V(x) = \begin{cases} V_0 > 0 & \text{für } x > 0 \\ 0 & \text{für } x < 0 \end{cases}, \quad (1.17)$$

und weiter sei $0 < E < V_0$. Durch Gleichsetzen der Wellenfunktionen und ihrer ersten Ableitungen erhalten wir folgende Anschlußregeln:

$$\frac{N \cdot e^{-\left| \int_{x_U}^x K dx' \right|}}{\sqrt{|K|}} \leftrightarrow \frac{2}{\sqrt{K}} \cdot \cos \left(\left| \int_{x_U}^x K dx' \right| - \frac{\Phi}{2} \right), \quad (1.18)$$

und

$$\frac{\bar{N} \cdot e^{\left| \int_{x_U}^x K dx' \right|}}{\sqrt{|K|}} \leftrightarrow \frac{\cos \left(\left| \int_{x_U}^x K dx' \right| - \frac{\bar{\Phi}}{2} \right)}{\sqrt{K}}, \quad (1.19)$$

mit

$$N = 2 \frac{[E(V_0 - E)]^{\frac{1}{4}}}{V_0^{\frac{1}{2}}}, \quad \Phi = 2 \arctan \left(\sqrt{\frac{V_0 - E}{E}} \right) \quad (1.20)$$

und $\bar{N} = N/2$, $\bar{\Phi} = -\Phi$. Die linken Seiten dieser Zuordnungsregeln geben also gerade die asymptotische Form der Wellenfunktionen in verbotenen Bereich an; die rechten Seiten die der *entsprechenden* auf der erlaubten Seite. Weil in diesem Beispiel die WKB-Funktionen im verbotenen Gebiet die SCHRÖDINGER-Gleichung exakt lösen, sind auch die Größen der zweiten Zuordnungsvorschrift (1.19) eindeutig definiert.

Eine interessante Eigenschaft dieses Beispiels ist die Tatsache, daß N und Φ nicht von \hbar abhängen, mithin ist ein Grenzübergang $\hbar \rightarrow 0$ nicht durchführbar. Im semiklassischen Limes würden wir $N = 1$, $\Phi = \pi/2$ erwarten, der Wert $\Phi = \pi/2$ wird für $E = V_0/2$ angenommen; der Wert $N = 1$ für $E = V_0 \cdot \left(\frac{2 \pm \sqrt{3}}{4} \right)$. Durch den Sprung im Potential kann der Standard-Fall (1.13) also nicht erreicht werden, da die Wellen überall viel länger sind als die hier verschwindende typische Änderungsskala des Potentials. In den Anschlußregeln werden so Modifikationen nötig [64], die sich in der Einführung der Amplituden N, \bar{N} und Phasen $\Phi, \bar{\Phi}$ widerspiegeln. Man sieht beispielsweise, daß im Limes $E \rightarrow 0$ die Amplituden gemäß $N, \bar{N} \propto E^{1/4}$ verschwinden, d.h. die Wellen werden im verbotenen Bereich zusätzlich zum Exponentialfaktor unterdrückt; ihre Phase Φ verhält sich, als ob sie auf eine unendlich hohe Wand trafe $\Phi = -\bar{\Phi} = \pi$. Die beiden oszillatorischen Wellen werden linear abhängig, weil für $x > 0$ die anwachsende und die abnehmende Wellenfunktion für $E \rightarrow 0$ identisch werden: $\psi|_{P^2 < 0} \equiv 0$.

Der Fall $N \approx 0$, $\Phi \approx \pi$ ist ein Beispiel für den *antiklassischen Limes*; er entspricht in der Regel der Situation, daß die in (1.16) definierte Anzahl der Wellenlängen oder Eindringtiefen in dem Bereich, in dem das Potential linearisierbar ist, klein gegen Eins ist. Hier sind dann natürlich die Standard-Anschlußregeln (1.13), (1.14) und die daraus resultierenden Folgerungen nicht mehr anwendbar.

Das Exponentialpotential [127]

$$V(x) = 4V_0 \exp(2\alpha x), \quad V_0 > 0, \quad \alpha > 0 \quad (1.21)$$

ist aufgrund der experimentellen Realisierbarkeit gerade in letzter Zeit von enormer praktischer Bedeutung, siehe z.B. [2], [142] und [189]; darüberhinaus verfügen

wir über seine exakte Lösung (auch zu $E \neq 0$) in Form einer modifizierten BESSEL-Funktion [1]:

$$\Psi(x) = K_{ik/\alpha} [2\sqrt{2mV_0}e^{\alpha x}/(\hbar\alpha)] \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0. \quad (1.22)$$

Hieraus kann man unter Berücksichtigung der Tatsache, daß für $E \neq 0$ die WKB-Wellenfunktionen sowohl für $x \rightarrow -\infty$, als auch für $x \rightarrow \infty$ exakt werden, obwohl das Potential hier sehr steil verläuft, die verallgemeinerte Amplitude N [64] und Phase Φ [33] in der modifizierten Anschlußformel (1.18) bestimmen:

$$N = \sqrt{1 - \exp\left(-\frac{2\pi k}{\alpha}\right)} \sim \begin{cases} \sqrt{2\pi k/\alpha} & \text{für } k \rightarrow 0 \\ 1 - e^{-2\pi k/\alpha}/2 & \text{für } k \rightarrow \infty \end{cases}, \quad (1.23)$$

und

$$\Phi = \pi - 2\arg\Gamma\left(1 + \frac{ik}{\alpha}\right) + 2\frac{k}{\alpha} \ln \frac{k}{2\alpha} - \frac{k}{\alpha} = \begin{cases} \pi & \text{für } k \rightarrow 0 \\ \pi/2 & \text{für } k \rightarrow \infty \end{cases}, \quad (1.24)$$

wo $k := \sqrt{2mE}/\hbar$ ist. Hier wird also der semiklassische Limes für kurze Wellenlängen erreicht, was man auch naiv erwarten würde. Analog zur Reflexion an der Stufe verschwindet im Falle niedriger Energien die Amplitude $N \propto E^{1/4}$, die Phase Φ geht gegen π , wir befinden uns im antiklassischen Grenzfall. Die asymptotische Bedingung $\Psi(x \rightarrow \infty) = 0$ legt die Lösung der Differentialgleichung und damit N und Φ eindeutig fest. Jede andere Lösung divergiert im verbotenen Gebiet; dies hat zur Folge, daß man, ohne weitere Bedingungen zu postulieren, \bar{N} und $\bar{\Phi}$ hier nicht eindeutig bestimmen kann, obwohl die SCHRÖDINGER-Gleichung vollständig analytisch lösbar ist.

Analog verfährt man beim inversen Exponentialpotential (die etwas unterschiedliche Parametrisierung im Vergleich zu (1.21) entspricht den späteren Anwendungen)

$$V(x) = -V_0 \exp(-\alpha x), \quad V_0 > 0, \quad \alpha > 0, \quad (1.25)$$

das wir hier für negative Energien $k := \sqrt{-2mE}/\hbar \geq 0$ diskutieren wollen. Im dritten Kapitel werden wir die Reflexion an diesem Potential für $E > 0$ untersuchen. Die für $x \rightarrow \infty$ verschwindende Lösung ist wieder gegeben durch eine BESSEL-Funktion [1]

$$\Psi(x) = C \cdot J_{2k/\alpha} [2\sqrt{2mV_0}e^{\frac{\alpha x}{2}}/(\hbar\alpha)] \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0, \quad (1.26)$$

wo $C = \text{const.}$ gilt. Im Falle $E \neq 0$ ist WKB asymptotisch, d.h. für $x \rightarrow \pm\infty$ anwendbar, und wir finden das auch im Verhalten der exakten Lösung

$$\Psi(x) \stackrel{x \rightarrow -\infty}{\sim} C \sqrt{\frac{\alpha}{\pi A}} e^{\frac{\alpha}{4}x} \cos\left(\frac{2A}{\alpha} e^{-\frac{\alpha}{2}x} - \frac{k\pi}{\alpha} - \frac{\pi}{4}\right), \quad (1.27)$$

mit $A^2 := 2mV_0/\hbar^2$; d.h. hier ist die WKB-Methode anwendbar, obwohl das Potential immer steiler verläuft. Wenn das Potential immer flacher wird, gilt

$$\Psi(x) \stackrel{x \rightarrow \infty}{\sim} C \cdot \left(\frac{A}{\alpha}\right)^{\frac{2k}{\alpha}} \frac{e^{-kx}}{\Gamma\left(1 + \frac{2k}{\alpha}\right)}; \quad (1.28)$$

auch dies entspricht einer WKB-Wellenfunktion. Durch Berechnung der Wirkungsintegrale und Vergleich mit (1.18) wird $\Phi = \pi/2$ und

$$N = \frac{\sqrt{\frac{\pi\alpha}{k}} \left(\frac{2k}{e\alpha}\right)^{\frac{2k}{\alpha}}}{\Gamma\left(\frac{2k}{\alpha}\right)}. \quad (1.29)$$

Für große k findet man durch Anwenden der STIRLINGSchen Formel $N \rightarrow 1$, also den semiklassischen Limes; für $k \rightarrow 0$ gilt $N \propto E^{1/4} \rightarrow 0$. Die Phase *allein* ist also kein geeigneter Indikator für das Erreichen des semiklassischen Limes', der bei $E \rightarrow -\infty$ liegt, denn es gilt ja $\Phi = \pi/2$, unabhängig von $E < 0$.

Im Grenzfall kleiner Energien, wo wir die deutlichsten Abweichungen von den semiklassischen Werten erwarten, können auch Potentiale der Form

$$V_\alpha(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{c^{\alpha-2}}{x^\alpha}, \quad c > 0, \quad \alpha > 2, \quad (1.30)$$

für $x > 0$ untersucht werden. Mit Hilfe der Ungleichung (1.11) rechnet man wieder leicht nach, daß die WKB-Methode bei derartigen Potentialen in der Nähe der Singularität sehr erfolgreich eingesetzt werden kann [125], was zunächst etwas kontraintuitiv erscheinen mag. Im Falle nichtverschwindender Energien kann man sie auch für $x \rightarrow \infty$ benutzen, wo das Potential immer flacher wird. Der Umkehrpunkt ist gegeben durch $x_0/c = (kc)^{-2/\alpha}$. Da die exakte Lösung dieses Potentials für $E \neq 0$ nicht bekannt ist, müssen wir uns mit derjenigen für $E = 0$ begnügen; wir tun dies im Bewußtsein, daß für $x < x_0$ der Einfluß des Potentials rasch den kleinen Energieterm in der SCHRÖDINGER-Gleichung überwiegt. Da in diese Gleichung die Energie $E = \hbar^2 k^2/(2m)$ und damit k^2 eingeht, sind obige Funktionen Lösungen in niedrigster Ordnung in k , und das nicht nur asymptotisch, sondern auch in der Nähe des Umkehrpunktes x_0 , so daß man sie dort aneinander anpassen kann. Die reguläre Lösung für $E = 0$ ist wieder eine modifizierte BESSEL-Funktion [1]:

$$\begin{aligned} \varphi_{\text{reg}}(x) &= c_1 \sqrt{x} K_{1/(\alpha-2)} \left[\frac{2}{\alpha-2} \left(\frac{c}{x}\right)^{(\alpha-2)/2} \right] \\ &\stackrel{x \rightarrow 0}{\sim} c_1 \frac{\sqrt{(\alpha-2)\pi x}}{2} \left(\frac{x}{c}\right)^{(\alpha/4)-(1/2)} \exp \left[-\frac{2}{\alpha-2} \left(\frac{c}{x}\right)^{(\alpha-2)/2} \right]. \end{aligned} \quad (1.31)$$

Auf der klassisch erlaubten Seite $x > x_0$ nähern wir die Wellenfunktion durch die eines freien Teilchens:

$$\psi_{\text{reg}}(x) = c_2 \cos [kx - kx_0 g(\alpha) - \Phi/2]. \quad (1.32)$$

Um die Randbedingung (1.18) zu erfüllen, muß gelten

$$\int_{x_0}^x K dx' \sim kx - kx_0 g(\alpha) \text{ für } x \rightarrow \infty, \quad (1.33)$$

d.h.

$$g(\alpha) := \frac{\sqrt{\pi} \Gamma\left(1 - \frac{1}{\alpha}\right)}{2 \Gamma\left(\frac{3}{2} - \frac{1}{\alpha}\right)}. \quad (1.34)$$

Das Anpassen am Umkehrpunkt liefert nun folgende Resultate:

$$\Phi \sim \pi - 2g(\alpha)(ck)^{1-(2/\alpha)} + 2f(\alpha)ck \text{ für } k \rightarrow 0, \quad (1.35)$$

wo $f(\alpha)$ gegeben ist durch

$$f(\alpha) := (\alpha - 2)^{[2/(\alpha-2)]} \frac{\Gamma\left(1 - \frac{1}{\alpha-2}\right)}{\Gamma\left(1 + \frac{1}{\alpha-2}\right)} \quad (1.36)$$

und

$$N \sim \frac{2\sqrt{\pi kc}}{\Gamma\left(1 + \frac{1}{\alpha-2}\right) (\alpha - 2)^{[\alpha/2(\alpha-2)]}} \text{ für } k \rightarrow 0. \quad (1.37)$$

Wie in den vorherigen Beispielen gilt also für kleine Energien $\Phi \approx \pi$ und $N \propto E^{1/4}$. Für andere analytisch lösbare Fälle läuft die Bestimmung der Amplituden und Phasen analog. Dieses Vorgehen hat den Vorteil, daß es gegebenenfalls genauer ist, als die herkömmliche WKB-Methode, jedoch büßt man an Allgemeinheit ein, weil das Potential in der Nähe der Umkehrpunkte auf spezielle, mathematisch zugängliche Formen begrenzt ist; was dann auch für die Folgerungen aus den jeweiligen Anschlußregeln gilt.

In den Bereichen, wo $P(x) \approx 0$ gilt, versagt die WKB-Methode normalerweise⁵ (1.11); die Ursache hierfür liegt in der Struktur der SCHRÖDINGER-Gleichung $-\hbar^2 \Psi'' = P^2 \Psi$: wenn die rechte Seite klein ist, kann die linke nicht als singuläre Störung ($\hbar \rightarrow 0$) betrachtet werden. Jedoch werden wir Methoden kennenlernen, die, basierend auf dem *klassischen* Wirkungsintegral als zentrale Größe, eine approximative Bestimmung quantenmechanischer Wahrscheinlichkeiten gerade im *antiklassischen* Limes erlauben: die Wellen sind aufgrund ihrer Länge dann blind für die Feinheiten des Potentials.

⁵Ausnahmen bilden beispielsweise Potentiale $\propto -1/x^4$; hier sind exakte Lösung und WKB-Funktion identisch für $E = 0$; eine weitere ist das attraktive COULOMB-Potential für $E = 0$, siehe etwa [22], [149].

Einige Eigenschaften der Standard-Anschlußregeln (1.13) und (1.13) werden manchmal als Nachteil empfunden, beispielsweise die festen Amplituden und Phasen, die uns zur Modifikation (1.18) und (1.19) bewogen haben; darüberhinaus ist die Divergenz am Umkehrpunkt damit ja noch nicht behoben. Daher mangelt es nicht an Versuchen, die Zuordnungsvorschriften zu verbessern oder ganz zu umgehen. Dadurch, daß man die Entwicklung nach \hbar weitertreibt, kommt man zu Anschlußregeln und Quantisierungsvorschriften in höherer Ordnung; diejenige für die exponentiell abfallende Welle findet man z.B. in [17]. Betrachtet man Potentiale bis einschließlich quadratischer Ordnung in x , so kann man mit Hilfe der Parabolischen Zylinderfunktionen, die die entsprechende SCHRÖDINGER-Gleichung dann exakt lösen, sogenannte Parabolische Anschlußformeln angeben, siehe z.B. [44]. Für das Exponentialpotential (1.21) hat schon BRINK [33] 1985 die exakte WKB-Phase berechnet, z.B. BRUEV [34] und PRESNYAKOV [172] haben im Rahmen der Quantisierungsbedingung Modifikationen an der Standard-Phase $\Phi = \pi/2$ vorgeschlagen, und, wie schon erwähnt, hat sich dann TROST in seiner Dissertation [200] systematisch, aber auch ausschließlich, mit der Phase Φ beschäftigt. Änderungen in den Amplituden wurden z.B. von KARNAKOV, MUR und POPOV [114] untersucht. Darüberhinaus werden in der Literatur verschiedenste Ansätze diskutiert, die zu divergenzfreien Approximationen der Wellenfunktionen führen, oder die die Anschlußformeln gänzlich vermeiden; beispielsweise seien hier [13], [38], [66], [91], [100], [117], [197] und [213] erwähnt, eine derartige Methode werden wir später ausführlich diskutieren.

In Anlehnung an das von MESSIAH gegebene Kriterium erwarten wir die Anwendbarkeit unserer modifizierten Zuordnungsvorschrift, wenn es links und rechts vom Umkehrpunkt Bereiche von der Ausdehnung mehrerer Wellenlängen gibt, in denen die WKB-Wellenfunktionen eine brauchbare Näherung sind; möglicherweise sind *lokal*, d.h. für bestimmte, vielleicht nur recht kleine Intervalle auf der x -Achse in der Nähe des Umkehrpunktes, schwächere Voraussetzungen ausreichend. Zur analytischen Bestimmung der Amplituden und Phasen fordern wir eine ausreichende Approximierbarkeit der kinetischen Energie mit einem lösbaaren Potential über diesen Zwischenraum, in dem WKB versagt, hinaus in das WKB-Gebiet.

1.4 Randbedingungen an die Wellenfunktion

Im vorigen Abschnitt haben wir ausgehend von einem einfachen Beispiel die modifizierten Anschlußformeln (1.18) und (1.19) angegeben; wegen der Kontinuitätsgleichung existiert noch eine Verknüpfung zwischen den Amplituden und Phasen: $N\bar{N} = \sin(\frac{\Phi-\bar{\Phi}}{2})$. Aufgrund der Tatsache, daß man zur exponentiell ansteigenden Wellenfunktion ein beliebiges Vielfaches der Abfallenden addieren kann, ohne die asymptotische Form zu ändern, sind die Größen \bar{N} und $\bar{\Phi}$ in der Regel schlecht definiert. Befindet man sich jedoch in einem Bereich konstanten Potentials, so sind die WKB-Wellenfunktionen *exakte* Lösungen der SCHRÖDINGER-

Gleichung; die Amplituden und Phasen sind damit eindeutig festgelegt.

Es stellt sich sofort die Frage, wie sich die Einführung der normalerweise energieabhängigen N, \bar{N} und $\Phi, \bar{\Phi}$ auf Standard-Formeln der semiklassischen Theorie, beispielsweise jener der Transmission durch eine Barriere oder etwa der Quantisierungsregel, auswirkt. Dies werden wir in diesem Abschnitt untersuchen. Die Wellenfunktion soll folgenden Randbedingungen genügen:

Für $x \rightarrow -\infty$

$$\Psi^l(x) = \frac{e^{i \int_{x_1}^x K dx'}}{\sqrt{K}} + r_{WKB} \frac{e^{-i \int_{x_1}^x K dx'}}{\sqrt{K}}, \quad (1.38)$$

und für $x \rightarrow \infty$

$$\Psi^r(x) = t_{WKB} \frac{e^{i \int_{x_2}^x K dx'}}{\sqrt{K}}, \quad (1.39)$$

wo x_1 , der Phasenreferenzpunkt der Reflexionsamplitude r_{WKB} , zwar mit dem linken Umkehrpunkt des Tunnelproblems identisch sein kann, aber keinesfalls sein muß; x_2 ist derjenige von t_{WKB} ; für ihn gilt analoges. Manchmal kann es sinnvoll sein, $x_1 = x_2$ zu wählen, man denke etwa an die Reflexion über einer Barriere. Diese Randbedingungen sind z.B. geeignet, den inversen Harmonischen Oszillator zu beschreiben, während hier eine auf ebenen Wellen beruhende Formulierung wenig sinnvoll erscheint.

Wenn nun für $x \rightarrow \pm\infty$ die WKB-Wellenfunktionen exakt werden, wofür wir schon Beispiele angegeben haben, dann werden auch die Amplituden r_{WKB} und t_{WKB} exakt, dies beinhaltet den normalerweise betrachteten Fall ebener Wellen, ist aber wesentlich allgemeiner. Falls das Potential asymptotisch konstant wird, ist der Zusammenhang von t_{WKB} oder r_{WKB} mit der konventionellen, auf ebenen Wellen $\exp(\pm ikx)$ basierenden Transmissionsamplitude t bzw. Reflexionsamplitude r gegeben durch die Forderung, daß dann die WKB-Funktionen mit den ebenen Wellen asymptotisch übereinstimmen sollen:

$$t_{WKB} = \sqrt{\frac{k_2}{k_1}} \cdot t \cdot \exp \lim_{x \rightarrow \infty} \left[-i \int_{-x}^{x_1} K dx' - i \int_{x_2}^x K dx' + ik_1 x + ik_2 x \right] \quad (1.40)$$

und

$$r_{WKB} = r \cdot \exp[2i \lim_{x \rightarrow -\infty} (\int_{x_1}^x K dx' - k_1 x)], \quad (1.41)$$

wo $k_{1,2}$ die Wellenzahlen weit links bzw. rechts sind. Der Faktor $\sqrt{\frac{k_1}{k_2}}$ auf der rechten Seite in (1.40) geht natürlich wegen der Normierung der WKB-Wellenfunktionen

ein, der Phasenunterschied kommt aufgrund der verschiedenen Bezugspunkte; nämlich dem Ursprung im Fall der ebenen Welle bzw. den Umkehrpunkt und x_1 für die WKB-Welle, zustande. Die Transmissionswahrscheinlichkeit T ist definiert als das Verhältnis von transmittiertem zu einlaufendem Strom, also gilt $T := \frac{k_2}{k_1}|t|^2 = |t_{WKB}|^2$; die Reflexionswahrscheinlichkeit ist $R := |r|^2 = |r_{WKB}|^2$. Wir haben schon gesehen, daß es in den Bereichen im Ortsraum, wo die WKB-Wellenfunktionen gute Approximationen sind, reicht, nur die x -Abhängigkeit der Phase zu berücksichtigen. Daher sind die Wellenfunktionen (1.8) dort näherungsweise Eigenfunktionen des Impulsoperators, so daß man ihnen eine Ausbreitungsrichtung zuordnen kann, was es wiederum ermöglicht, Überlagerungen derartiger Wellen *eindeutig* nach ein- und auslaufenden zu zerlegen. Erst dies macht es sinnvoll, Transmission und Reflexion mit den Randbedingungen (1.38) und (1.39) zu untersuchen, die dann aber, wie schon erwähnt, allgemeiner als die auf ebenen Wellen basierenden sind. Die stationäre Kontinuitätsgleichung $\frac{d}{dx}[J_{Ges}] = 0$ liefert den Zusammenhang der Wahrscheinlichkeiten:

$$1 - |r_{WKB}|^2 = |t_{WKB}|^2 = \frac{k_2}{k_1}|t|^2. \quad (1.42)$$

Erwähnenswert, wenn auch für uns von untergeordnetem Interesse, ist folgende Tatsache: Betrachtet man das gleiche Potential, aber am Ursprung gespiegelte Randbedingungen, so gibt es zwischen den Reflexions- und Transmissionsamplituden beider Systeme Zusammenhänge, die man z.B. in [127] oder [145] findet und auf die entsprechenden WKB-Größen umrechnen kann. Beispielsweise stellt sich heraus, daß in beiden Fällen die Transmissions- bzw. Reflexionswahrscheinlichkeit bei fester Energie unabhängig von der Einfallrichtung ist [71].

In der vorliegenden Arbeit werden wir uns hauptsächlich auf zwei Szenarien konzentrieren, die sich in der Anzahl der klassischen Umkehrpunkte unterscheiden: während es geradezu das Wesen der klassisch verbotenen Reflexion ist, daß es keine Umkehrpunkte gibt, sind es beim Tunneln bzw. bei gebundenen Zuständen mindestens zwei.

Für ein Tunnelproblem mit zwei Umkehrpunkten x_1 und x_2 liefert nun eine einfache Rechnung folgenden Ausdruck, der auch dann gilt, wenn die Bedingungen des semiklassischen Limes' nicht erfüllt sind, was z.B. für die langen Wellen am Fuß einer Barriere der Fall ist:

$$t_{WKB} = \frac{iN_1N_2}{\Theta e^{i(\Phi_1+\Phi_2)/2} - \frac{N_1N_2}{4\Theta N_1N_2} e^{i(\bar{\Phi}_1+\bar{\Phi}_2)/2}}. \quad (1.43)$$

Hierbei spielen das Wirkungsintegral $J(E) := \int_{x_1}^{x_2} |K| dx'$ über den verbotenen Bereich $(x_1; x_2)$ und die davon abhängende Größe Θ in der semiklassischen Beschreibung von Tunnelphänomenen eine zentrale Rolle:

$$\Theta(E) := \exp \left[\left[\int_{x_1}^{x_2} K dx' \right] \right] = \exp(J). \quad (1.44)$$

Bei der Herleitung dieser Gleichung schreibt man die Randbedingung (1.39) um in

$$\Psi^r = \frac{C}{\sqrt{K}} \cdot \cos \left(\int_{x_2}^x K dx' - \frac{\Phi_2}{2} \right) + \frac{\bar{C}}{\sqrt{K}} \cdot \cos \left(\int_{x_2}^x K dx' - \frac{\bar{\Phi}_2}{2} \right), \quad (1.45)$$

mit

$$C = \frac{2t_{WKB} \exp(-i\Phi_2/2)}{\exp(-i\bar{\Phi}_2) - \exp(-i\Phi_2)}, \quad \bar{C} = \frac{2t_{WKB} \exp(-i\bar{\Phi}_2/2)}{\exp(-i\bar{\Phi}_2) - \exp(-i\Phi_2)}. \quad (1.46)$$

Wenn im klassisch verbotenen Bereich die Anwendung der WKB-Theorie erlaubt ist, erhält man unter Berücksichtigung der Anschlußregeln (1.18) — dies entspricht beispielsweise der Anwendung der Zuordnungsvorschrift (1.13) entgegen der Pfeil-Richtung — und (1.19) und der Zerlegung des Wirkungsintegrals $\int_{x_1}^{x_2} |K| dx' = \int_{x_1}^x |K| dx' + \int_x^{x_2} |K| dx'$ folgende Wellenfunktion:

$$\psi^m = \frac{A}{\sqrt{|K(x)|}} \exp \left[- \int_{x_1}^x dx' |K(x')| \right] + \frac{B}{\sqrt{|K(x)|}} \exp \left[\int_{x_1}^x dx' |K(x')| \right], \quad (1.47)$$

mit

$$A = \bar{C} \bar{N}_2 \Theta, \quad B = \frac{C N_2}{2\Theta}. \quad (1.48)$$

Erneutes Anwenden der Anschlußregeln liefert den Koeffizienten der einlaufenden Welle und damit t_{WKB} :

$$\frac{A}{N_2} \exp(i\Phi_1/2) + \frac{B}{2\bar{N}_2} \exp(i\bar{\Phi}_1/2) = 1. \quad (1.49)$$

Im Fall einer symmetrischen Barriere braucht man nicht zwischen linken und rechten Indices zu unterscheiden, was obige die Formel vereinfacht:

$$t_{WKB} = iN^2 \left[\Theta e^{i\Phi} - \frac{N^2}{\bar{N}^2} \frac{1}{4\Theta} e^{i\bar{\Phi}} \right]^{-1}; \quad (1.50)$$

hier gilt für die Transmissionswahrscheinlichkeit

$$T = |t_{WKB}|^2 = |t|^2 = \left[\left(\frac{\Theta}{N^2} - \frac{1}{4\Theta \bar{N}^2} \right)^2 + 1 \right]^{-1}, \quad (1.51)$$

und für große $\Theta = \exp(J)$ wird weiter

$$T \approx \frac{N^4}{\Theta^2} = N^4 \exp(-2J). \quad (1.52)$$

Im semiklassischen Fall $N = 1$ wird daraus die herkömmliche Standardformel für die Transmissionswahrscheinlichkeit

$$T \approx \Theta^{-2} = \exp(-2J), \quad (1.53)$$

die in der Literatur oft — auch für asymmetrische Barrieren — angegeben wird, siehe z.B. [22], [31], [125] und [184].

Unter der Voraussetzung, daß man die Amplituden und Phasen bestimmen kann, liefern die Formeln (1.43) und (1.50) das exakte Resultat, ein Beispiel hierfür ist das Kastenpotential der Höhe V_0 und Breite a :

$$V(x) = \begin{cases} V_0 > 0 & \text{für } |x| \leq a/2 \\ 0 & \text{für } |x| > 0 \end{cases}. \quad (1.54)$$

Setzt man hier die Werte für N, \bar{N} und $\Phi, \bar{\Phi}$, die wir bei der scharfen Stufe gefunden haben (1.20), ein, so erhält man die Transmissionsamplitude t_{WKB} , die gemäß Gleichung (1.40) dem exakten t für dieses Potential entspricht [64].

Den semiklassischen Anschlußregeln von PAULI [168] und MERZBACHER [144] entsprechen die Werte $N_{1;2} = \bar{N}_{1;2} = 1$ und $\Phi_{1;2} = -\bar{\Phi}_{1;2} = \pi/2$. Setzt man diese in (1.43) ein, so erhält man MERZBACHERS Transmissionsformel [105], [144]:

$$T = [\Theta + 1/(4\Theta)]^{-2}. \quad (1.55)$$

Eine andere wichtige Penetrabilitätsformel wurde von KEMBLE angegeben und wird bis in die jüngste Zeit immer wieder in der Literatur diskutiert, siehe z.B. [45], [117] und [118]:

$$T = 1/[\Theta^2 + 1]. \quad (1.56)$$

Sie gilt exakt für Potentiale der Form $\propto -x^2$. Direkt am Gipfel der Barriere verschwindet das Wirkungsintegral; die Transmission wird $T = 1/2$ für $J = 0$.

Analog zu (1.49) erhält man als Koeffizienten der reflektierten Welle:

$$\frac{A}{N_2} \exp(-i\Phi_1/2) + \frac{B}{2\bar{N}_2} \exp(-i\bar{\Phi}_1/2). \quad (1.57)$$

Damit gilt für r_{WKB} beim Tunneln durch eine Barriere mit zwei Umkehrpunkten:

$$r_{WKB} = \frac{\frac{\bar{N}_2}{N_1} \Theta e^{-i(\Phi_1 + \bar{\Phi}_2)/2} - \frac{N_2}{4\Theta \bar{N}_1} e^{-i(\Phi_2 + \bar{\Phi}_1)/2}}{\frac{\bar{N}_2}{N_1} \Theta e^{-i(-\Phi_1 + \bar{\Phi}_2)/2} - \frac{N_2}{4\Theta \bar{N}_1} e^{-i(\Phi_2 - \bar{\Phi}_1)/2}}, \quad (1.58)$$

wobei für große Θ , d.h. für eine sehr dichte Barriere und endliche $\bar{N}_{1;2}$ gilt:

$$r_{WKB} \approx \exp(-i\Phi_1) \left[1 - \frac{N_1 N_2 \exp[i(\bar{\Phi}_2 - \Phi_2)/2]}{2\Theta^2 \bar{N}_1 \bar{N}_2} \cdot \cos\left(\frac{\Phi_1 - \bar{\Phi}_1}{2}\right) \right], \quad (1.59)$$

die im Grenzfall $\Theta \rightarrow \infty$ einen Phasenverlust von Φ_1 an der reflektierten Welle verursacht, während r_{WKB} und r unimodular sind. Dann erhalten wir aus Gl.(1.38):

$$\Psi'(x) \propto \frac{1}{\sqrt{K}} \cos \left(\int_x^{x_1} K dx' - \frac{\Phi_1}{2} \right), \quad \Theta \rightarrow \infty, \quad (1.60)$$

womit wir wieder bei (1.18) angelangt sind. Wegen dieser Eigenschaft heißt Φ_1 auch „Reflexionsphase“.

Als ein weiteres Beispiel betrachten wir hier kurz die semiklassische Quantisierung einer Resonanz, die für spezielle Potentialformen erst jüngst wieder diskutiert wurde [211]. Für den Fall, daß die Barriere näherungsweise als invertierte Parabel betrachtet werden kann, haben POPOV, MUR und SERGEEV eine Quantisierungsformel angegeben [171]. Wir werden mit Hilfe unserer Quantisierungsregel gleich ein Beispiel analysieren, bei dem diese Annahme sicher nicht gerechtfertigt ist. Zu deren Herleitung sei der Potentialtopf so, daß er auch quantenmechanisch nur nach rechts (d.h. für $x \rightarrow \infty$) verlassen werden kann; weiterhin gebe es einen Innenbereich, in dem die WKB-Methode anwendbar ist. Dann hat die von links in den WKB-Bereich kommende Welle die durch Gl.(1.18) gegebene Form; die von rechts wird durch Gl.(1.38) beschrieben. Setzt man nun die logarithmischen Ableitungen dieser Funktionen an einem Punkt in der Mulde, wo WKB eine gute Näherung ist, gleich (wobei man zu beachten hat, daß es reicht, beim Ableiten lediglich die x -Abhängigkeit der Phasen zu berücksichtigen), so erhält man folgende Quantisierungsregel:

$$\int_{x_0}^{x_1} K dx' = v\pi + \frac{\Phi_0}{2} + \frac{i}{2} \ln(r_{WKB}), \quad (1.61)$$

wo $v \in \mathbf{N}_0$ gilt. Ist nun r_{WKB} unimodular, was einer undurchdringlichen Barriere ($\Theta \rightarrow \infty$) entspricht, so erhält man eine phasenkorrigierte BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung, siehe z.B. [22], [172], [200]. Für großes, aber endliches Θ kann man Gl.(1.59) hier einsetzen, wozu man auch die gestrichenen Größen zumindest näherungsweise kennen muß. Am Ende des nächsten Kapitels wird kurz erklärt, wie man sich diese verschaffen kann.

Wir wollen nun einen Potentialtopf betrachten, dessen eine Wand von einer Delta-Barriere gebildet wird:

$$V(x) = \begin{cases} \rightarrow \infty & \text{für } 0 \geq x \\ \frac{\hbar^2}{m} \Omega \cdot \delta(x - a) & \text{für } x > 0 \end{cases}, \quad (1.62)$$

mit $a, \Omega > 0$. Aus der SCHRÖDINGER-Gleichung folgen die Anschlußbeziehungen für die Wellenfunktion (1.38) und (1.39) bei $x = a$: $\varphi'(a+) - \varphi'(a-) = 2\Omega \cdot \varphi(a)$ und $\varphi(a)$ stetig. Damit wird die Reflexionsamplitude:

$$r_{WKB} = \frac{1}{i \frac{k}{\Omega} - 1}. \quad (1.63)$$

Wie man sich leicht klarmacht, verschwindet das Wirkungsintegral über die Wurzel der Distribution. Da wir links eine harte Wand haben, müssen wir $\Phi_0 = \pi$ einsetzen, und erhalten schließlich eine Quantisierungsbedingung, die in diesem Beispiel mit der exakten [71] übereinstimmt:

$$\tan(ka) = \frac{1}{i - 2\frac{\Omega}{k}}. \quad (1.64)$$

Rechnet man mit komplexer Energie $E = E_r - i\Gamma/2$, wo E_r die Lage und Γ die Breite der Resonanz sind, $k = \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E_r - i\Gamma/2) \right]^{1/2}$, dann bekommt man für $1 \gg |\frac{\Gamma}{2E_r}|^2$ und $1 \gg |k/\Omega|$ aus der Quantisierungsbedingung (1.61)

$$\begin{aligned} \frac{2m}{\hbar^2} E_r &= \left[\frac{(v+1)\pi - \frac{m\Gamma}{4\hbar^2\Omega^2}}{a + \frac{1}{2\Omega}} \right]^2 \quad \text{und} \\ \frac{m}{\hbar^2} \Gamma &= \frac{(v+1)\pi}{2\Omega^2 \left(a + \frac{1}{2\Omega} \right)^2 + \frac{1}{4\Omega^2}}, \end{aligned} \quad (1.65)$$

d.h., die Resonanz ist umso schmaler, je kleiner die Quantenzahl v und je größer die Stärke der Barriere Ω ist. Im Limes $\Omega \rightarrow \infty$ bekommt man Energieniveaus, die mit denen des Kastenpotentials vergleichbar sind. Zur Illustration der Methode haben wir ein sehr einfaches Beispiel gewählt; zum Vergleich mit allgemeineren Fällen kann man beispielsweise ein Programm verwenden, das man von den Autoren von [192] erhält. Im vorliegenden Fall war die Bestimmung des Umkehrpunktes aufgrund des Potentialverlaufs einfach, obwohl wir mit komplexen Energien gerechnet haben. Speziell Resonanzen mit extrem kleinen Breiten sind interessant; SIDKY, BEN-ITZHAK und andere haben in jüngster Zeit erst wieder darauf hingewiesen, daß die herkömmliche WKB-Methode zwar die Lage von Resonanzen, nicht aber deren Breite ausreichend gut wiedergeben kann, was besonders bei sehr engen Resonanzen ein Problem ist [192]; gerade dann ist aber auch eine numerische Lösung recht aufwendig, aber der komplexe Beitrag zu den Umkehrpunkten sollte an Bedeutung verlieren, so daß unsere Theorie gut anzuwenden ist.

Dadurch, daß man in der Quantisierungsbedingung (1.61) $|r_{WKB}|^2 = 1 - T$, wo T die Penetrabilität ist, schreibt, erhält man für schmale Breiten näherungsweise die bekannte Formel

$$\frac{m}{\hbar^2} \Gamma \approx -\frac{\ln(1-T)}{2 \int_{x_0}^{x_1} \frac{dx'}{K}} \approx \frac{T}{2 \int_{x_0}^{x_1} \frac{dx'}{K}}. \quad (1.66)$$

Wir werden später sehen, daß die herkömmlichen Methoden speziell bei kleinen Transmissionen Werte liefern können, die um Größenordnungen falsch sind, was sich natürlich auch in den Breiten niederschlägt. Ähnlich liegen die Dinge bei der Niveaufspaltung in einem Doppelmuldenpotential [80], [107], [169], das auch in

jüngster Zeit wieder diskutiert wird [30], [46], [164]⁶ und („WKB is known to be wrong for the ground state splitting“) [90], siehe hierzu jedoch auch [82], p. 117 und [178]. Man kann derartige exakt lösbare Doppelmulden gezielt konstruieren [39]. Dies eröffnet wiederum die Chance, mit darauf aufbauenden Näherungen, wie etwa der noch ausführlicher zu besprechenden Methode der Vergleichspotentiale, dann auch Aussagen für allgemeinere Fälle zu machen.

Aus all diesen Gründen heraus ist es unser Ziel, einfache und möglichst allgemeine, aber auch möglichst genaue Methoden zur Berechnung der Transmission zu finden. Das folgende Kapitel ist dieser Aufgabe gewidmet.

Im Fall der klassisch verbotenen Reflexion über einer Potentialstufe haben wir keine Umkehrpunkte, und damit keine Anschlußregeln zur Verfügung. Die Fälle, in denen der Hauptbeitrag der Reflexion von Unstetigkeiten im Potential oder einer seiner Ableitungen kommt, an denen man die Wellenfunktionen aneinander anpassen kann, sind für uns von untergeordnetem Interesse. Wie wir noch sehen werden, kann der Bereich, in dem die WKB-Näherung versagt, für kleine, aber endliche Energien sehr groß werden, jedoch gelten auch hier weiterhin die Randbedingungen (1.38) und (1.39). Ein wesentliches Ziel muß es sein, hier eine möglichst allgemeingültige Näherung für r_{WKB} anzugeben, und damit dieses Anschlußproblem zu lösen. Kennt man die exakte Lösung $\Psi(x)$ des Reflexionsproblems, so kann man natürlich r_{WKB} dadurch bestimmen, daß man in dem Bereich kleiner x -Werte, wo WKB anwendbar ist, die Gleichheit der Wellenfunktionen und der Ableitungen fordert; man paßt die beiden Wellen am Punkt x_m aneinander an. Dies liefert:

$$r_{WKB} \cdot e^{-2i \int_{x_1}^{x_m} K(x') dx'} = -\frac{z - iK(x_m) + \frac{K'(x_m)}{2K(x_m)}}{z + iK(x_m) + \frac{K'(x_m)}{2K(x_m)}} \approx -\frac{z - iK(x_m)}{z + iK(x_m)}, \quad (1.67)$$

mit der logarithmischen Ableitung $z := \Psi'(x_m)/\Psi(x_m)$. Der jeweils dritte Summand im Zähler bzw. Nenner rührt von den Ableitungen der Amplituden der WKB-Wellenfunktionen her; wenn es ausreichend ist, nur die Phasen abzuleiten, kann man ihn vernachlässigen. Später werden wir uns oft nur für Reflexionswahrscheinlichkeiten interessieren, hierfür spielt die Phase von r_{WKB} keine Rolle.

⁶Die Autoren dieser Arbeit betrachten auch die Möglichkeit vom Standardwert abweichender Phasen.

Kapitel 2

Tunneln

...many important features of quantum tunneling are found to lie beyond the reach of the conventional WKB approximation.

L.V. CHEBOTAREV: The postclassical approximation in quantum tunneling

Initiiert sowohl durch die Feldemission aus kalten Metallen wie die Energieabhängigkeit der α -Strahlung wurden bereits 1928 mehrere Arbeiten zum Tunnelvorgang publiziert [50]. Jedoch ist dieser Effekt bis heute für viele Gebiete der Physik relevant, und die Vergabe einiger Nobelpreise steht in direktem oder indirektem Zusammenhang damit.

Sind klassisch erlaubte Gebiete durch eine oder mehrere endliche Potentialbarrieren getrennt, findet man in der Regel¹ endliche Wahrscheinlichkeiten für das quantenmechanische Durchdringen des verbotenen Bereichs; dies ist der Tunneleffekt, die entsprechende Transmissionswahrscheinlichkeit wird manchmal auch als Penetrabilität bezeichnet. Sie hängt vom Potential und der Energie ab, d.h. alle wesentlichen Informationen sind im Wirkungsintegral vorhanden. Neben sehr bekannten Anwendungen wie etwa bei der Voraussage der Lebensdauern beim α -Zerfall, die um sehr viele Größenordnungen variiert [108], der spontanen Kernspaltung, wo die Barriere beträchtlich komplizierter sein kann, als sie im vorigen Beispiel meist angenommen wird, der elektrischen Leitung durch isolierende Kontaktstellen, was im Falle von Supraleitern auch die JOSEPHSON-Effekte umfaßt, oder etwa der Rastertunnelmikroskopie STM, dient der Tunneleffekt auch zur Erklärung der Entstehung des Universums, wo man sich bei der Quantisierung der WHEELER-DEWITT-Gleichung für das Analogon der Tunnelwahrscheinlichkeit nahe der Schwelle interessiert. Ob man trotz der hier gültigen Randbedingungen

¹VON NEUMANN und WIGNER haben beispielsweise gezeigt, daß man einfach (bei bestimmten Energien) „tunnelfreie“ radiale Potentiale konstruieren kann, deren Verlauf für große r etwa durch $V(r) \propto \sin(kr)/r$ gegeben ist, die dennoch gebundene Zustände im Kontinuum $k^2 > 0$ haben [14]. Wie man übrigens mittlerweile sogar experimentell bestätigt hat, gibt es auch gebundene Zustände bei derartig hohen Energien, daß ein klassisches Teilchen die Barrieren überwinden würde [148].

die semiklassische Transmissionsformel benutzen darf, wie es z.B. in der vereinfachten Theorie [11] gemacht wurde, kann, wie aus dem Inhalt dieses Kapitels klar werden wird, bezweifelt werden. Wie wir schon früher angedeutet haben, wird es hier das Ziel sein, speziell in Schwellennähe verbesserte Formeln zu erhalten.

Wir interessieren uns hier nur für das effektiv eindimensionale, stationäre Tunneln, werden uns also nicht mit Tunnelzeiten und zeitabhängigen Methoden [30], [63], [137] oder Tunneln in mehreren Dimensionen [12] beschäftigen. Ebensovienig werden wir auf verschiedene Zugänge, wie etwa die Erklärung des Tunnelvorgangs als Hüpfen über die Barriere unter Ausnutzung der Energie-Zeit-Unschärfe [49] oder diverse komplexe Fortsetzungen [143] eingehen. Wir sind einzig an der möglichst genauen, einfachen und allgemeinen Behandlung der Tunnelwahrscheinlichkeit bei niedrigen Energien interessiert.

Als Wellenphänomen kann Tunneln auch bei Lichtwellen beobachtet werden; hinter einer totalreflektierenden Fläche ist die Intensität nicht exakt gleich Null, wenn sie auch rasch abnimmt. Eine derartige evaneszente Welle kann nun sogar selbst wieder als Potential mit exponentiellem Verlauf auf darin befindliche Atome wirken [2], [142], [189]. Dies ist ein Grund dafür, warum speziell Potentiale mit exponentiellen Schwänzen wichtig sind; wir werden sie intensiv untersuchen.

In diesem Kapitel werden wir uns mit dem Tunneln durch Potentiale beschäftigen, die für $|x| \rightarrow \infty$ schneller als $1/x^2$ abfallen. Für diese Fälle ist das Wirkungsintegral auch für $E = 0$ und damit die übliche semiklassische Transmission endlich, obwohl die exakte verschwindet. Die Zentrifugalbarriere wird in einem späteren Kapitel unter Zuhilfenahme anderer Methoden behandelt.

Wir werden wieder mit der Methode der Vergleichspotentiale, die uns schon zur Herleitung der WKB-Wellenfunktionen diente, arbeiten. Sie ist seit langem bekannt [22], [57], [79], [82], [100], [117], [118], [212] und wurde meist ausgehend vom Harmonischen Oszillator benutzt. Zur Untersuchung schwellennaher Phänomene ungeeignet, werden wir ein anderes Potential wählen. Hierfür müssen wir die SCHRÖDINGER-Gleichung exakt lösen können, womit wir über einen allgemeinen Ausdruck für die Transmissionswahrscheinlichkeit, der von der Höhe und Breite der Barriere sowie der Energie abhängt, verfügen. Diese Parameter des Vergleichspotentials wählen wir so, daß es dem zu untersuchenden Potential möglichst „ähnlich“ wird, d.h. daß die Wirkungsintegrale gleich werden. Speziell wird sich bei unserer Vorgehensweise herausstellen, daß die zu benutzende Breite von der Energie abhängt. Diese Werte setzen wir dann in die bekannte Penetrabilitätsbeziehung des Vergleichspotentials ein, um eine Näherung für das zu untersuchende Problem zu erhalten. Eine ähnliche Theorie wurde schon 1965 von ZHIRNOV entwickelt [212], aber nach meinem Kenntnisstand bisher nie mit numerisch exakten Daten verglichen. Die besprochene Vorgehensweise liefert prinzipiell auch sog. gleichmäßig gültige Näherungen („*uniform approximations*“) der Wellenfunktion, die im Umkehrpunkt nicht divergieren, was aber hier nicht weiter vertieft werden soll; unser Zugang ist gerade möglichst unabhängig von expliziten Kenntnissen

über die Wellenfunktion konzipiert.

Zunächst werden wir uns Barrieren mit großem Wirkungsintegral zuwenden, bei denen die übliche semiklassische Theorie anwendbar sein sollte, weil man dann in der Barriere nicht beide exponentiell verlaufende Funktionen zu berücksichtigen braucht. Man kann dann die Anschlußregeln (1.13) und (1.14) in Richtung der Pfeile benutzen.

Wir werden jedoch zeigen, daß dieses Kriterium nicht hinreichend dafür ist, daß die WKB-Transmission akzeptable Werte liefert. Es werden die Resultate verschiedener Penetrabilitätsformeln, etwa auch der unter Zuhilfenahme der modifizierten Anschlußformeln gewonnenen, im Limes kleiner Energien mit den numerisch exakten Lösungen verglichen.

Dann betrachten wir noch den Fall von Barrieren mit kleinem Wirkungsintegral, und vergleichen wieder mit numerisch exakten Werten.

Teile dieses Kapitels wurden bereits in [64], [152] und [153] veröffentlicht.

2.1 Tunneln durch „dichte“ Barrieren

Die Herleitung der üblichen semiklassischen Transmissionsformel wird normalerweise [82], [125], [149], [184] wie folgt durchgeführt: ausgehend von einer puren auslaufenden Welle in einem klassisch erlaubten Gebiet arbeitet man sich unter Zuhilfenahme der Anschlußbedingungen entgegen der Stromrichtung durch die Barriere. Wenn diese hinreichend dick, d.h. das Wirkungsintegral hinreichend groß ist, kann man die abfallende (d.h. in Richtung des Stroms ansteigende) WKB-Wellenfunktion in der Barriere vernachlässigen. Die resultierende Wellenfunktion setzt man dann ins andere erlaubte Gebiet fort. Daraus lernen wir zwei Dinge: erstens kann die so erhaltene Formel nur gelten, wenn das Wirkungsintegral groß genug ist und zweitens wird aufgrund unserer Vorgehensweise die Kontinuitätsgleichung nicht mehr erfüllt sein, weil wir ursprünglich mit einer auslaufenden Welle begonnen haben, aber mit einer reellen, d.h. mit verschwindendem Strom, enden. Beides führt zu dem Schluß, daß die herkömmliche Formel nur für sehr kleine Transmissionen brauchbar ist. Paradoxe Weise werden wir feststellen, daß sie trotzdem im Limes verschwindender Penetrabilität versagt.

Im letzten Kapitel sind wir schon daran gegangen, diese auf den herkömmlichen Anschlußregeln basierende konventionelle WKB-Penetrabilität (1.53) Θ^{-2} ,

mit $\Theta(E) := \exp \left[\int_{x_1}^{x_2} K dx' \right] = \exp(J)$ zu verbessern, was eine Modifikation der

Anschlußregeln erfordert: die Einführung der Amplituden ist hier entscheidend. 1997 wurde von CHEBOTAREV [45] festgestellt, daß bisherige semiklassische Methoden am Fuß einer Barriere versagen. Für Potentiale, die asymptotisch schneller als $\propto x^{-2}$ abfallen, hat dies den einfachen Grund, daß das Wirkungsintegral für $E \rightarrow 0$ gegen einen endlichen Wert konvergiert; also gibt auch obige Formel, oder z.B. diejenigen von MERZBACHER Gl.(1.55) oder KEMBLE Gl.(1.56) einen endli-

chen Wert an, obwohl die exakte Transmission dann verschwindet. Daher rührte unsere Beschäftigung mit dieser Thematik, und letztlich auch die Modifikation der Anschlußregeln in der schon besprochenen Form.

Dieses Versagen der herkömmlichen WKB-Approximation findet ihre Begründung in der Tatsache, daß der Kurzwellenlimes nicht angewandt werden darf. In dieser Arbeit soll besonderes Augenmerk auf Situationen gelegt werden, wo *lange* Wellen wichtig sind. Seit Jahrzehnten Gegenstand der Forschung, siehe etwa [59]; wurde dies jedoch speziell in letzter Zeit durch den experimentellen Fortschritt im Zusammenhang mit BOSE-EINSTEIN-Kondensaten ein hochinteressantes Thema [182], [207]. Eine numerische Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung kann hier durchaus nichttrivial sein. Darüberhinaus sind die erwünschten analytischen Ausdrücke in der Regel einfach zu interpretieren und leicht weiterzuverarbeiten.

Wir haben bereits im letzten Kapitel darauf hingewiesen, daß beim Tunneln durch

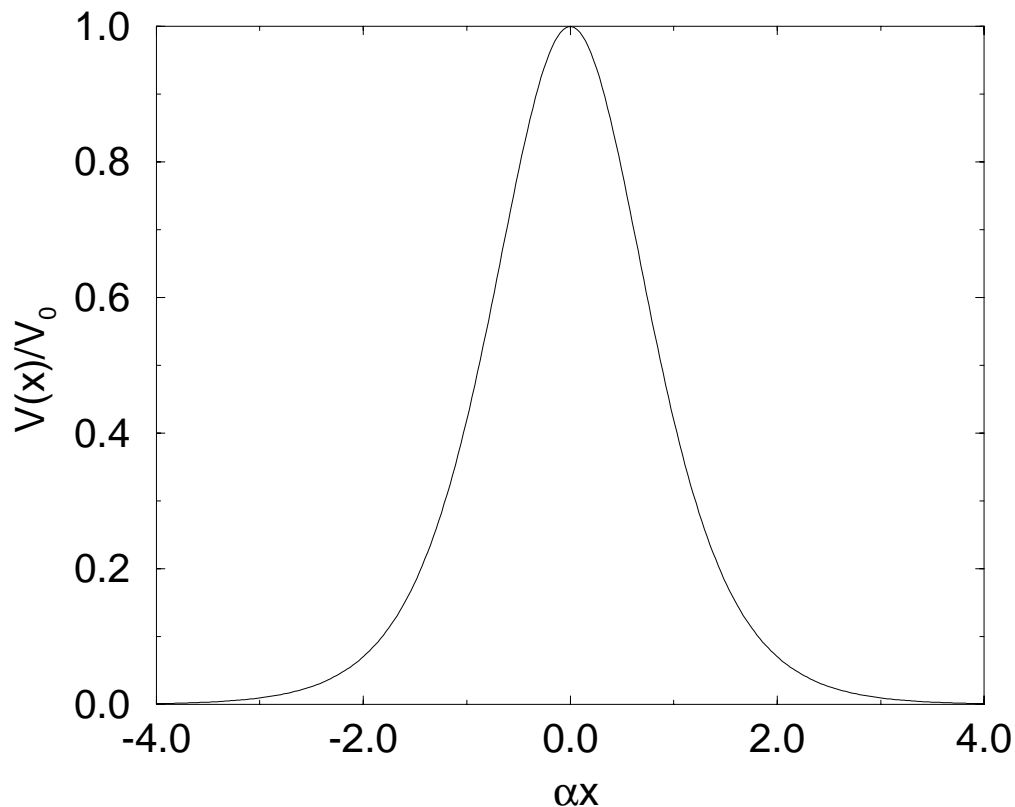


Abbildung 2.1: Unser Vergleichspotential (2.3).

ein Kastenpotential Gl.(1.54) das *exakte* Resultat reproduziert wird, wenn man in die modifizierte Transmissionsformel (1.51) die Werte für die Stufe, Gl.(1.20), einsetzt. Das liegt daran, daß die WKB-Wellenfunktionen hier exakte Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung sind.

Ähnlich kann man im Falle eines homogenen Potentialschwanzes (1.30) im Grenzfall niedriger Energien verfahren; man setzt N aus Gl.(1.37) in Gl.(1.52) ein, und erhält [64]:

$$T = \frac{16\pi^2 k^2 c^2}{\left[\Gamma\left(1 - \frac{1}{n-2}\right) (n-2)^{[n/(n-2)]} \right]^4 \Theta^2}, \quad (2.1)$$

hierzu muß sich das Potential im gesamten Bereich, wo WKB nicht anwendbar ist, wie der homogene Potentialschwanz $V(x) \approx \frac{\hbar^2 c^{n-2}}{2m |x|^n}$, $c > 0$, $n > 2$, verhalten, von dem wir ausgegangen sind. Wie wir später sehen werden, muß dafür das Potential hinreichend hoch sein; d.h. die Transmission ist dann sehr klein. Überlagerungen homogener Potentialschwänze kann man mit Näherungsmethoden, die nahe der Schwelle immer besser werden, beispielsweise der säkularen Störungsrechnung, die wir im letzten Kapitel besprechen werden, untersuchen. Für ein Potential der Form

$$V(x) = \frac{V_0}{1 + (x/a)^8}, \quad V_0 > 0, \quad a > 0 \quad (2.2)$$

findet man in [64] den Vergleich der Penetrabilität (2.1) mit dem numerisch exakten Resultat und der WKB-Formel; hier sieht man die Güte dieser Näherung für kleine Energien, wo WKB um Größenordnungen versagt. Jedoch sind die betroffenen Penetrabilitäten nur ca. 10^{-16} oder kleiner. Wir werden später ein ähnliches Potential noch mit mehreren Methoden, die wir sofort besprechen werden, untersuchen.

Das Potential

$$V(x) = V_0 / \cosh^2(\alpha x), \quad V_0 > 0, \quad \alpha > 0 \quad (2.3)$$

wird als „Vergleichspotential“, also als Basis unserer Methode dienen; es ist in Abb. 2.1 gezeigt. In [125] ist eine Lösung der entsprechenden SCHRÖDINGER-Gleichung angegeben; wir wollen sie hier $X(x)$ nennen. In Analogie zu unserer Herleitung der WKB-Wellenfunktionen, (1.2), gehen wir mit dem Ansatz

$$\psi(S) = [dS/dx]^{-\frac{1}{2}} X(S) \quad (2.4)$$

in die SCHRÖDINGER-Gleichung (1.1) ein und vernachlässigen den Term

$$[S'(x)]^{\frac{1}{2}} \frac{d^2}{dx^2} [S'(x)]^{-\frac{1}{2}} = \left[\frac{3 (S'')^2}{4 (S')^2} - \frac{1 S'''}{2 S'} \right], \quad (2.5)$$

der uns sagt, daß diese Methode insbesondere für $S' = 0$ versagen wird. Damit haben wir wieder eine Gleichung für die Funktion $S(x)$:

$$[S']^2 \left[k^2 - \frac{\Lambda^2}{\cosh^2(\alpha S)} \right] = K^2(x), \quad (2.6)$$

mit $k := \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ und $\Lambda^2 := \frac{2mV_0}{\hbar^2}$. $K(x)$ ist die Wellenzahl des zu approximierenden Potentials. An den Umkehrpunkten verschwindet der Impuls, $K(x_{1/2}) = 0$; dies gibt uns Randbedingungen für die Integration $S(x_{1/2}) = \mp \frac{1}{\alpha} \operatorname{arccosh} \sqrt{\frac{V_0}{E}}$. Natürlich sollen der Gipfel des echten und des Vergleichspotentials am selben Punkt $S(x = 0) = 0$ liegen, und dort sollen beide Potentiale auch gleich hoch sein. Damit ist der einzige freie Parameter im Vergleichspotential dessen Breite α . Eine Integration² über das klassisch verbotene Gebiet liefert dann die Vergleichsbreite

$$\alpha = \frac{2\pi \left[\sqrt{\frac{mV_0}{2\hbar^2}} - \frac{k}{2} \right]}{\int_{x_1}^{x_2} |K| dx}. \quad (2.7)$$

Setzt man in $K(x)$ ebenfalls das Vergleichspotential ein, so erhält man damit natürlich den korrekten Wert von α zurück (d.h. für die zweiparametrische Schar von Potentialen $A/\cosh^2(bx)$ liefert diese Methode das exakte Resultat, wie man es auch erwartet); bei anderen Potentialen ist zu beachten, daß die Dicke der Vergleichsbarriere in der Regel von der Energie abhängen wird.

Wie in [125] nachzulesen ist, ist die Transmissionswahrscheinlichkeit für dicke Barrieren

$$\frac{8mV_0}{\hbar^2} = 4\Lambda^2 > \alpha^2 \quad (2.8)$$

durch das Vergleichspotential gegeben durch

$$T = \frac{\sinh^2\left(\frac{\pi k}{\alpha}\right)}{\sinh^2\left(\frac{\pi k}{\alpha}\right) + \cosh^2\left[\frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2 \alpha^2} - 1}\right]}. \quad (2.9)$$

Mit unserer Darstellung von α bekommen wir so eine Näherung für die Transmissionswahrscheinlichkeit,

$$T = \frac{\sinh^2\left(\frac{kJ}{\Lambda - k}\right)}{\sinh^2\left(\frac{kJ}{\Lambda - k}\right) + \cosh^2\left[\frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{4\Lambda^2 J^2}{\pi^2[\Lambda^2 - k^2]} - 1}\right]}, \quad (2.10)$$

wo $J = \int_{x_1}^{x_2} |K| dx$ das Wirkungsintegral über den verbotenen Bereich ist. Diese Formel ermöglicht uns also die Umrechnung der Tunnelwahrscheinlichkeit von

²Die Berechnung des Wirkungsintegrals findet man etwa in [82].

$T(E, V_0, \alpha)$ auf $T(E, V_0, J)$ bei festem Potentialmaximum. Wenn das Potential für $|x| \rightarrow \infty$ stärker als $O(x^{-2})$ abfällt, kann J einen zwar großen, aber doch nur endlichen Wert für $E \rightarrow 0$ annehmen, weswegen die gewöhnlichen WKB-Transmissionsformeln, die einen nichtverschwindenden Wert vorhersagen, dann auch versagen. Für niedrige Energien gilt hier

$$T = 4 \frac{E}{V_0} J^2 \exp \left(-\pi \sqrt{\frac{4J^2}{\pi^2} - 1} \right), \quad (2.11)$$

was uns zeigt, daß die Transmission in einer solchen Situation proportional zu E beginnt. Ähnliche Formeln sind seit langem wohl- wenn auch sicherlich nicht weitbekannt [212]; sie wurden aber nach meinem Kenntnisstand noch nie mit numerisch exakten Werten verglichen, was hier noch geschehen soll. Wir werden sehen, daß sie sehr gute Näherungen der Tunnel-Wahrscheinlichkeit für niedrige Energien liefern können. Obwohl z.B. BERRY und MOUNT [22] sowohl die \cosh^{-2} -Barriere, als auch die Methode der Vergleichspotentiale diskutieren, geben sie obige Methode so nicht an.

Eine weitere Herleitung des obigen Resultats kann folgendermaßen gegeben werden: wir wissen, daß sich unser Vergleichspotential (2.3) für $|x| \rightarrow \infty$ wie $4V_0 \exp(-2\alpha|x|)$ verhält, und dafür haben wir die Amplitude N bereits im vorigen Kapitel angegeben (1.23). Gl.(1.52) liefert dann mit unserem Wert von α

$$T = 4 \sinh^2 \left(\frac{\pi k}{\alpha} \right) \exp \left(-2J - \frac{2\pi k}{\alpha} \right) \approx 4 \frac{E}{V_0} J^2 \exp(-2J), \quad (2.12)$$

wo der letzte Teil der Gleichung, den wir in den folgenden Bildern zeigen, für kleine k gilt, und für große J ist dies analog zu (2.11)

In Abb. 2.2 sieht man die Transmission durch die Barriere

$$U(x) = U_0 \exp(-a^2 x^2), \quad (2.13)$$

mit $U_0 = a = 1$ verglichen mit den beschriebenen Approximationen, aufgetragen gegen das Verhältnis der kinetischen Energie im Unendlichen, d.h. die Gesamtenergie geteilt durch die Höhe der Barriere. Die durchgezogene Linie zeigt das numerisch exakte Resultat, die langgestrichelte Linie wurde mit der vollständigen Vergleichsformel (2.10) berechnet, die kurzgestrichelte mit der vereinfachten (2.12). Die gepunktete Linie stellt die KEMBLE-Formel (1.56) dar. Im Grenzfall kleiner Energien, wo das Wirkungsintegral fast konstant ist, sind die KEMBLE-Formel und die nicht gezeigte gewöhnliche $1/\Theta^2$ fast gleich; beide aber um Größenordnungen falsch. Hier sind die beiden Formeln (2.10) und (2.12) gute Näherungen, während die Formeln, die einen homogenen bzw. einfachen exponentiellen Schwanz voraussetzen, natürlich gar nicht anwendbar sind. Für höhere Energien ist die Näherung (2.10) exzellent, während die vereinfachte (2.12) von der Qualität ungefähr gleichwertig mit KEMBLEs Formel ist. Nahe dem Gipfel der Barriere versagt die vereinfachte Formel aufgrund des Faktors J^2 ; hier ist die KEMBLE-Formel etwas besser,

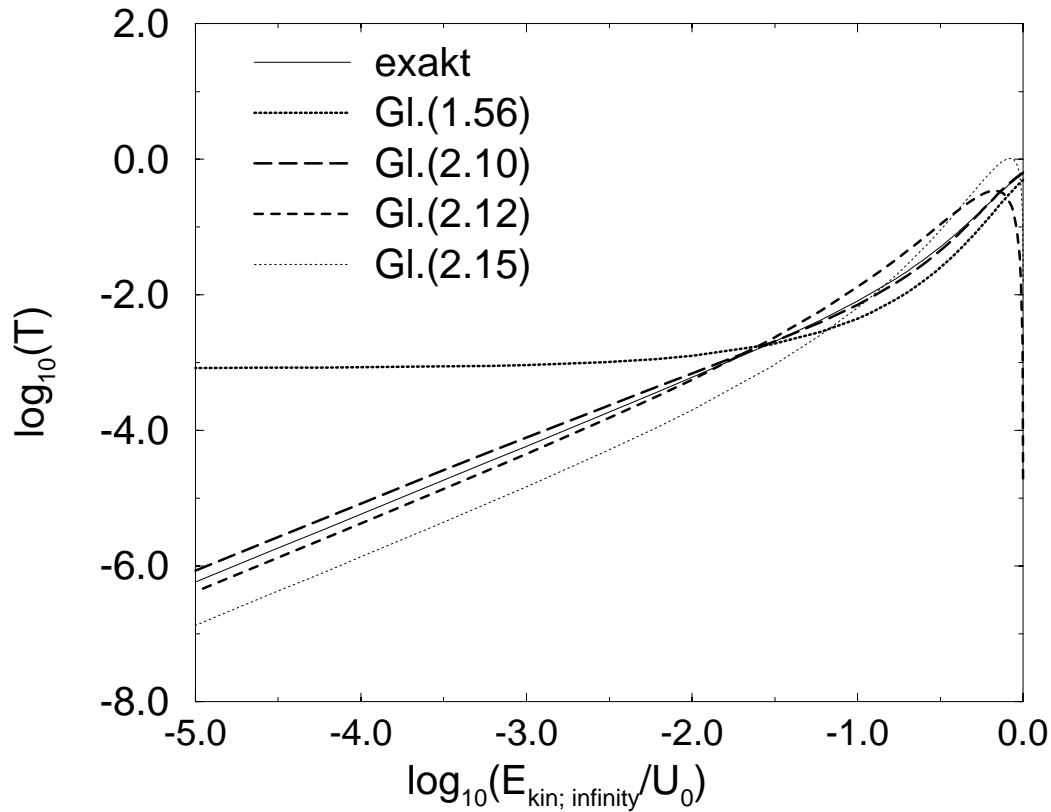


Abbildung 2.2: Logarithmus der Transmission für das GAUSS-Potential (2.13) mit $U_0 = a = 1$ als Funktion der Energie. Links ist man bei kleinen Energien am Fuß der Barriere; rechts an deren Gipfel.

als die gewöhnliche Penetrabilität Θ^{-2} , daher haben wir diese aufgetragen. Abb. 2.4 zeigt die Transmission wieder als Funktion der Gesamtenergie durch das Potential (siehe Abb. 2.3)

$$U(x) = \frac{U_0}{1 + (ax)^{12}}, \quad (2.14)$$

mit $U_0 = a = 1$, was uns einen Vergleich mit der Formel für homogene Potentialschwänze (2.1) ermöglicht. Die durchgezogene Linie ist wieder die numerisch exakte Lösung, die langgestrichelte gibt Gl.(2.10) wieder, die vereinfachte Transmissionsformel (2.12) wird gestrichelt dargestellt, die Werte der KEMBLE-Formel sehen wir gepunktet und das auf dem Niederenergie-Limes homogener Potentialschwänze basierende Resultat (2.1) zeigt die strichpunktierte Linie.

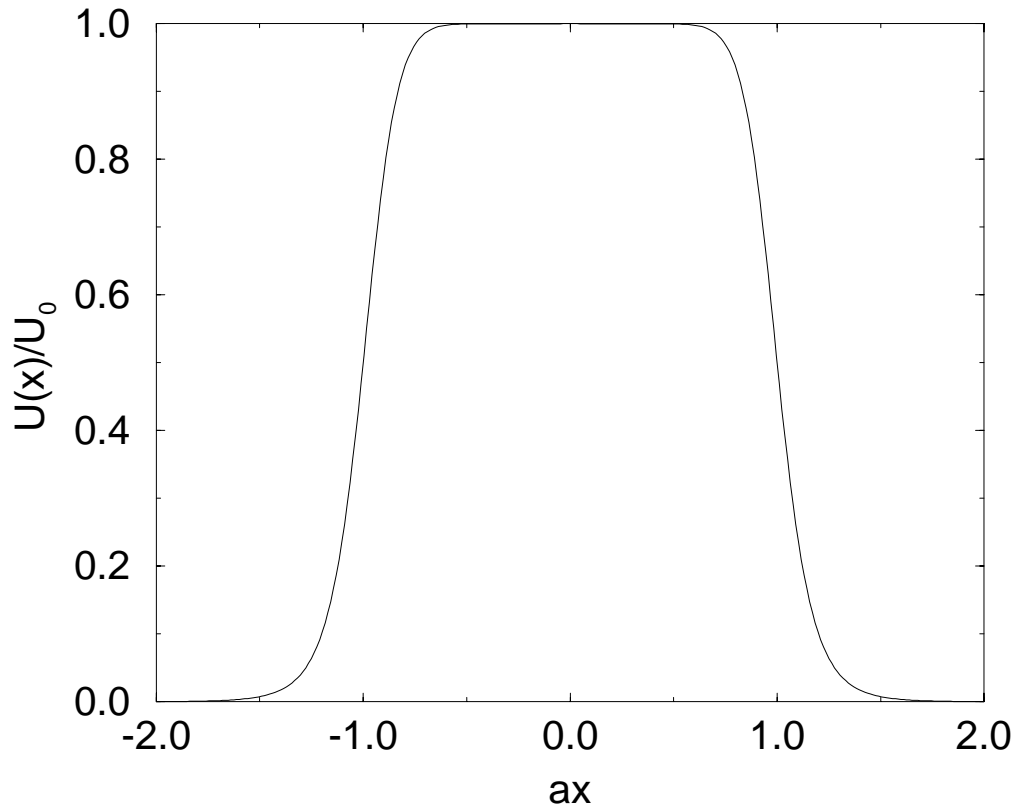


Abbildung 2.3: Barriere mit homogenen Schwanz (2.14).

Während die KEMBLE-Formel näherungsweise einen konstanten Wert für kleine Energien ergibt, zeigen die anderen Formeln die richtige Steigung $\propto E$. Allerdings haben die Daten auf der Basis von Gl.(2.1) einen Fehler von mindestens einer Größenordnung, während die anderen Formeln viel bessere Näherungen darstellen. Dies findet seine Ursache in der Tatsache, daß sogar für kleine Energien der Bereich, wo WKB versagt, nicht auf den homogenen Schwanz $\propto x^{-12}$ beschränkt ist, sondern sich näher zum Ursprung hin erstreckt. Hier sieht das Potential näherungsweise wie ein Kastenpotential der Höhe V_0 aus, für den man eine approximative Transmission in vielen Lehrbüchern [144], [184] findet (offensichtlich muß man in SCHIFFs Gl.(17.8) α durch a ersetzen):

$$T = 16 \frac{E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp(-2J), \quad (2.15)$$

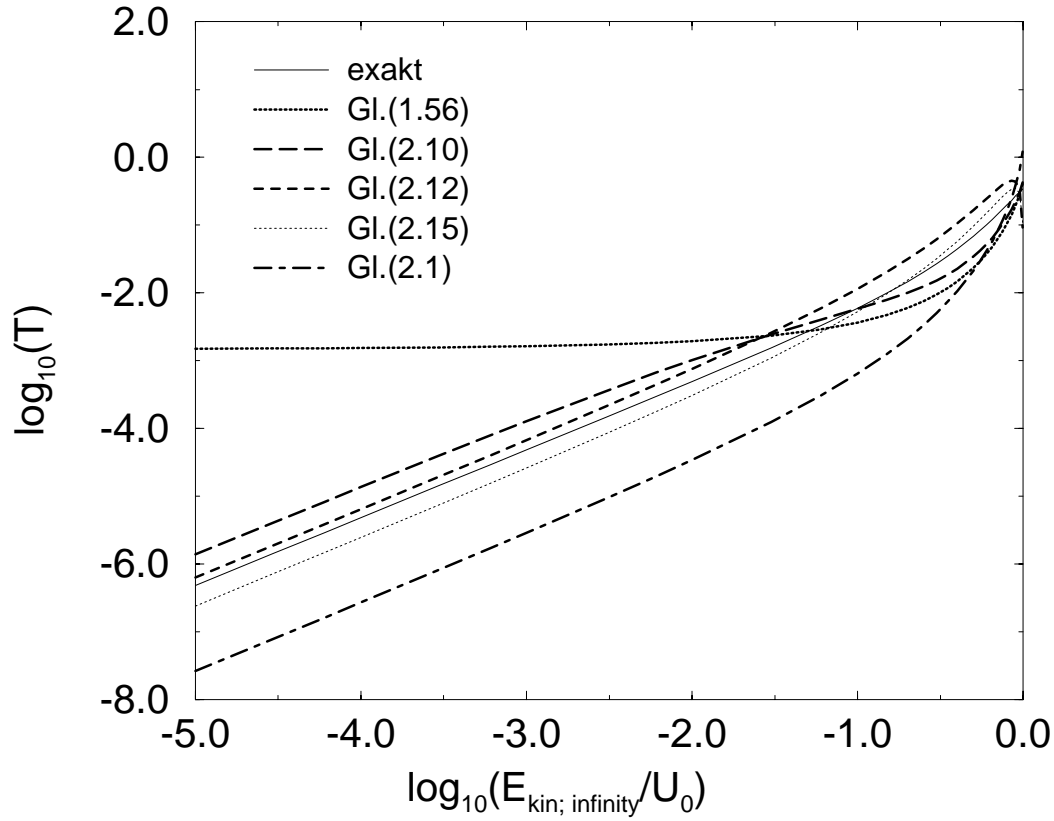


Abbildung 2.4: Logarithmus der Transmission für das Potential (2.14) mit $U_0 = a = 1$ als Funktion der Energie.

für $J \gg 1$. Diese Formel kann man z.B. finden, indem man das N für die scharfe Stufe der Höhe V_0 , Gl.(1.20),

$$N = 2 \frac{[E(V_0 - E)]^{\frac{1}{4}}}{V_0^{\frac{1}{2}}} \quad (2.16)$$

in (1.52) einsetzt. In unserem Beispiel (2.14) finden wir, daß die so gegebenen Transmissionen (2.15) besser sind, als die auf dem homogenen Schwanz basierenden und sogar etwas besser als (2.10). Für das GAUSS-Potential (2.13) liefert hingegen Gl.(2.10) bessere Werte, als die auf dem Kasten basierende Gl.(2.15), was man aufgrund der Ähnlichkeit zwischen GAUSS- und \cosh^{-2} -Potential auch erwarten würde. Bemerkenswert ist jedoch die Tatsache, daß für beide Beispiele die vereinfachte Formel (2.12) die beste Approximation für kleine Energien

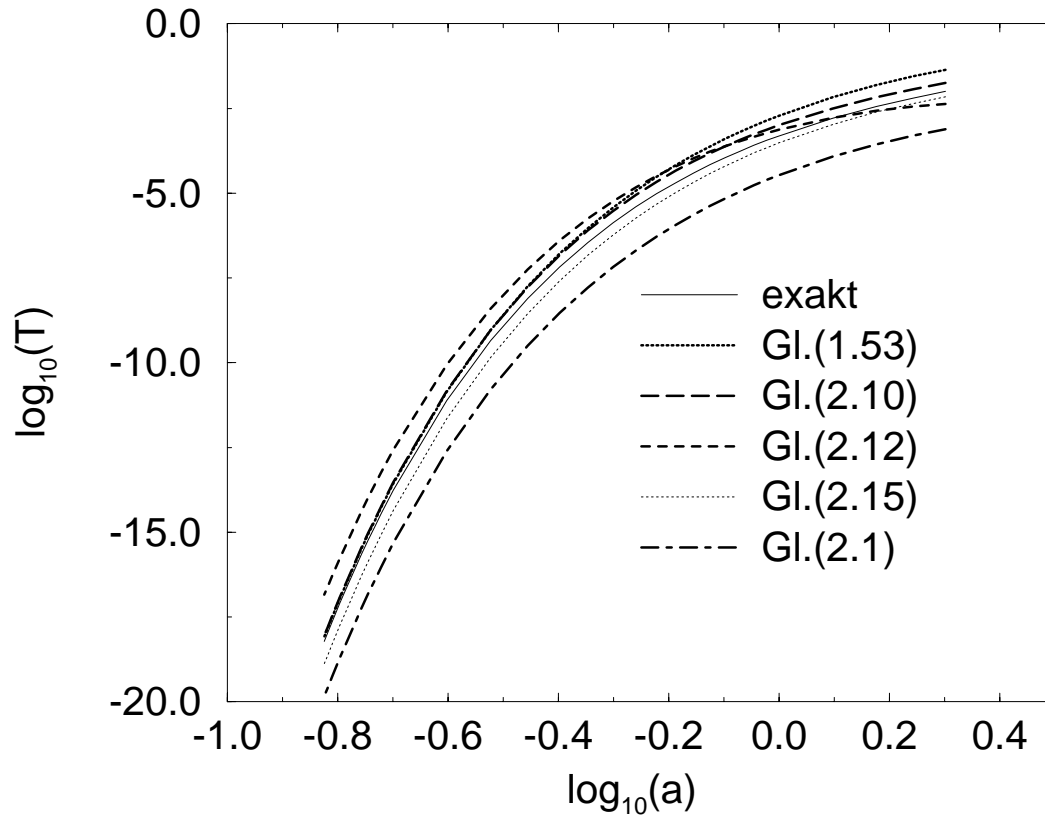


Abbildung 2.5: Logarithmus der Transmission für das Potential (2.14) als Funktion des Breite-Parameters a ; $U_0 = 1$, $E = 0.01$. Hier und im weiteren sind alle Größen in atomaren Einheiten.

darstellt. Diese Formel haben wir ja durch ähnliches Vorgehen wie beim Kasten abgeleitet, jedoch natürlich mit dem entsprechenden N (1.23). Nach der modifizierten Anschlußformel (1.18) beinhaltet N die Informationen über das Potential in den Bereichen, wo die WKB-Methode versagt. *Grob gesagt, kann man die besten Ergebnisse von demjenigen Vergleichspotential erwarten, das gerade dort am besten mit dem wirklichen übereinstimmt.* Damit ist es gelungen, die Behandlung ähnlicher Probleme auf die wesentlichen Größen, nämlich die Potentialhöhe und das entsprechende Wirkungsintegral, zurückzuführen.

Wenn der gesamte Bereich, in dem WKB nicht anwendbar ist, durch den homogenen Potentialschwanz beschrieben werden kann, dann erwarten wir, daß — zumindest bei hinreichend niedrigen Energien — die darauf beruhende Näherung Gl.(2.1) immer besser wird. Daher haben wir in den Abbildungen 2.5 bzw. 2.6

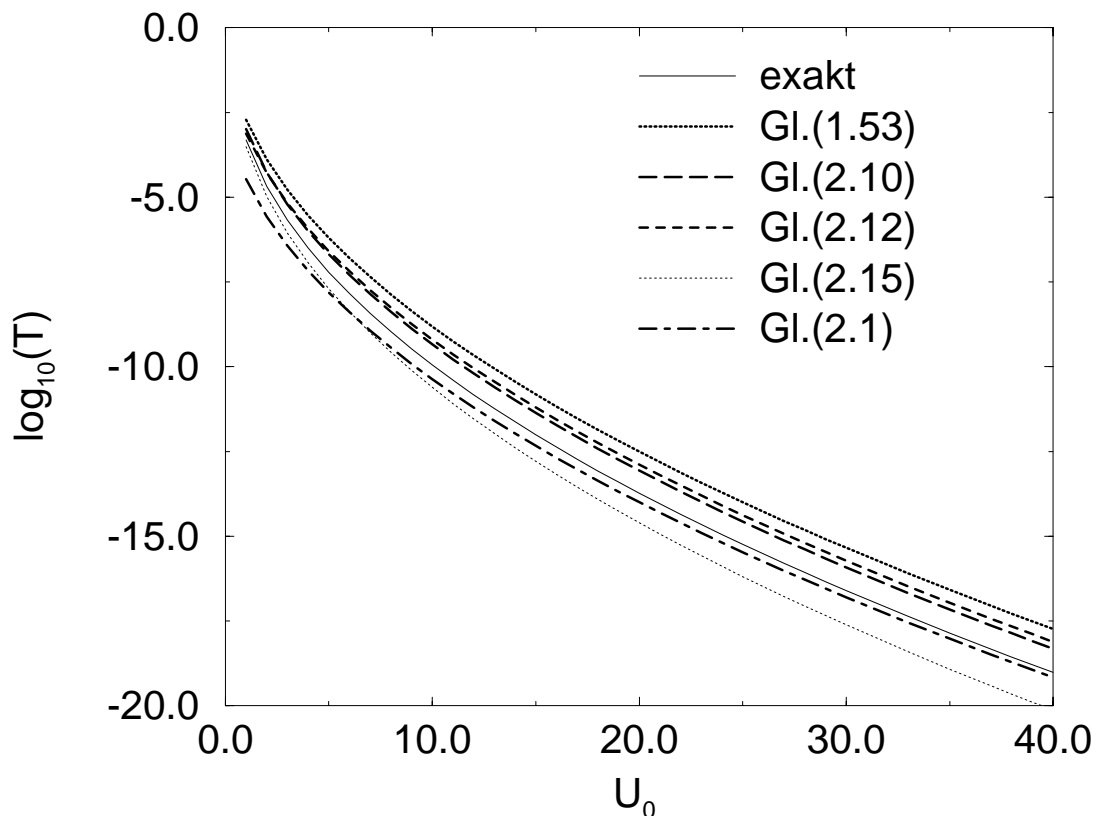


Abbildung 2.6: Logarithmus der Transmission für das Potential (2.14) als Funktion der Potentialhöhe U_0 ; $a = 1$, $E = 0.01$.

noch der Breite- bzw. Höhe-Parameter des Potentials (2.14) variiert; die Bedeutung der Kurven ist wie vorher, nur daß wir statt der KEMBLE-Formel hier die übliche semiklassische Penetrabilität Θ^{-2} benutzt haben, die hier, weit weg vom Gipfel des Potentials, beide ähnlich in der Qualität sind. Man kann die Höhe und Breite der Barriere nicht beliebig ändern; für kleine Werte des Wirkungsintegrals müssen wir mit anderen Näherungen arbeiten, was im nächsten Abschnitt besprochen wird. Man sieht in Abb. 2.5, wo die Transmission bei fester Energie als Funktion der Breite dargestellt ist, daß bei den dort gewählten Parametern sogar die gepunktete semiklassische Penetrabilität den globalen Verlauf der exakten Kurve ganz gut wiedergibt. Bei kleinen Werten von a , d.h. bei breiten Barrieren liefert sie und Gl.(2.10) ähnlich gute Werte. Jedoch ist die Barriere zu niedrig, als daß die Näherung eines homogenen Potentialschwanzes (2.1) sinnvoll angewandt

werden kann: einerseits sollte a möglichst groß sein, damit das Potential auch bei betragsmäßig kleinen Werten von x gut durch den Schwanz zu approximieren ist; andererseits fordert die Gültigkeit der WKB-Approximation, daß a klein sein soll. In Abb. 2.6 sieht man die Transmissionswahrscheinlichkeit als Funktion der Potentialhöhe; wie man auch naiv erwarten würde, kann man bei höher werdendem Potential immer besser von der Näherung des homogenen Potentialschwanzes (und natürlich relativ niedriger Energie) ausgehen. Die Transmission wird dann jedoch extrem gering.

Die hier gezeigten Beispiele belegen, daß der Zugang über Vergleichspotentiale sehr allgemein ist (wie es der WKB-Methode entspricht), die einzige Größe, die eingeht, ist das Wirkungsintegral über den verbotenen Bereich. Dieses müßte auch bei den semiklassischen Ausdrücken der Penetrabilität, z.B. Θ^{-2} , bestimmt werden, aber durch die Verwendung geeigneterer Formeln erhalten wir hier ohne weiteren Aufwand realistische Werte. Wenn es ein Gebiet gibt, in dem sowohl WKB, als auch die Näherung des homogenen Schwanzes schlecht sind, können darüberhinaus damit sogar in Situationen, in denen die Asymptotik des Potentials prinzipiell eine analytische Lösung bei $E = 0$ zuließe, durch ein geeignetes Vergleichspotential wesentlich bessere Resultate erzielt werden, wie wir etwa in Abb. 2.4 gesehen haben.

2.2 Kleine Wirkung: durchlässigere Barrieren?

Die Gl.(2.11) haben wir unter der Annahme einer hinreichend „dichten“ Barriere $\frac{8mV_0}{\hbar^2 a^2} > 1$ erhalten; ihr exponentieller Teil entspricht ungefähr der gewöhnlichen semiklassischen Transmissionsformel $1/\Theta^2$, für dessen Gültigkeit in der Literatur übereinstimmend Kleinheit gegen Eins gefordert wird, siehe beispielsweise [82],[125], [144], [184] und besonders MORSE und FESHBACH [156], p. 1100; aber wir sahen bereits, daß sie versagen kann, obwohl dieses Kriterium erfüllt ist. Nun interessieren wir uns für durchlässigere Barrieren. Im Falle des \cosh^{-2} -Potentials

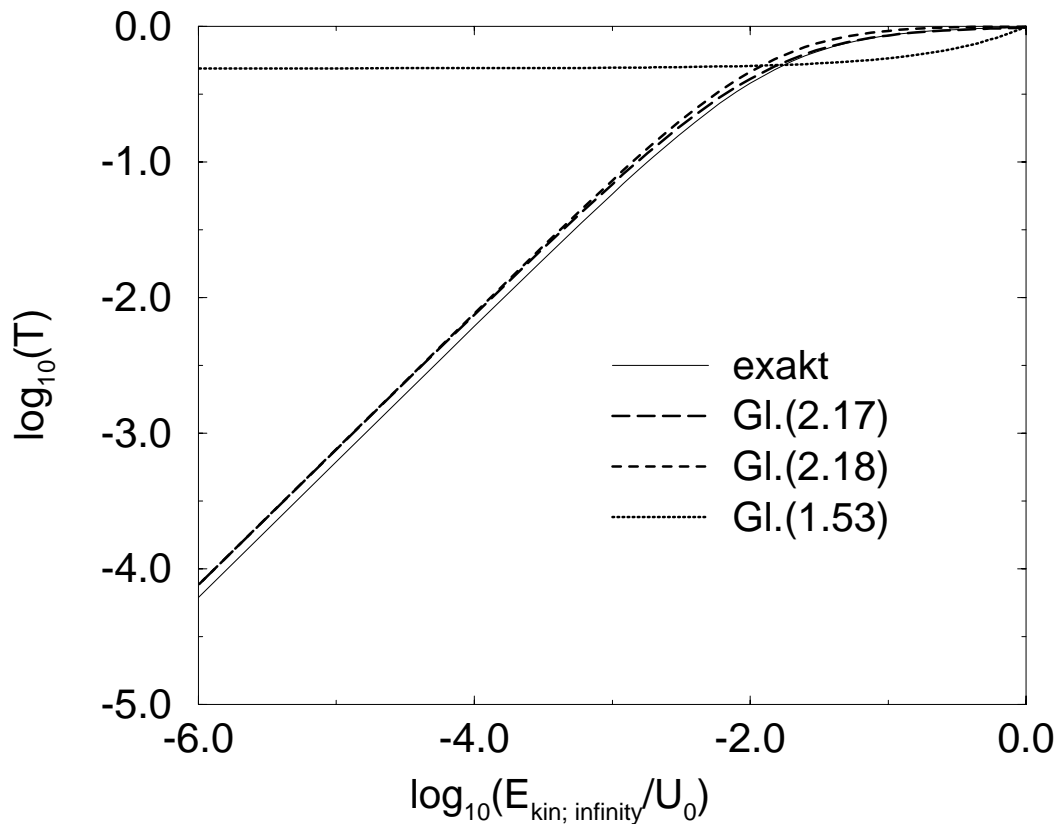


Abbildung 2.7: Logarithmus der Transmission für das Potential (2.13) als Funktion der Energie für $U_0 = 1$ und $a = 10$, d.h. für eine sehr schmale Barriere.

kennt man die exakte Transmission [125], und eine Rechnung analog der obigen

liefert (hier gilt im Gegensatz zu (2.8) die Ungleichung $\frac{8mV_0}{\hbar^2} = 4\Lambda^2 < \alpha^2$)

$$T = \frac{\sinh^2\left(\frac{kJ}{\Lambda-k}\right)}{\sinh^2\left(\frac{kJ}{\Lambda-k}\right) + \cos^2\left[\frac{\pi}{2}\sqrt{1 - \frac{4\Lambda^2 J^2}{\pi^2[\Lambda^2 - k^2]}}\right]}, \quad (2.17)$$

damit ist für niedrige Energien

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0}{EJ^2} \cos^2\left[\frac{\pi}{2}\sqrt{1 - \frac{4J^2}{\pi^2}}\right]}. \quad (2.18)$$

Abb. 2.7 vergleicht diese Formel mit dem exakten Resultat einer GAUSS-Barriere (2.13), wo wir $U_0 = 1$ und $a = 10$ gewählt haben. Während (2.17) und (2.18) gute Näherungen für kleine Energien darstellen, werden die Resultate von (2.17) für höhere Energien exzellent. Unterhalb der Spitze der Barriere versagt die semi-klassische Transmissionsformel vollständig, was man auch erwarten konnte, da das oben erwähnte Kriterium dichter Barrieren nicht erfüllt ist. Gepunktet ist Θ^{-2} gezeigt; dies ist hier sogar am Gipfel der Barriere eine bessere Näherung als die KEMBLE-Formel.

Die Methode der Vergleichspotentiale führt auf die Gleichheit der Wirkungsintegrale, und damit auf energieabhängige Breiten $\alpha(E)$ der Barrieren (2.7). Bei sehr niedrigen, aber endlichen Energien kann man nun den Wert der Vergleichsbreite α zu verschwindender Energie $\alpha(E = 0)$, der normalerweise erheblich einfacher zu berechnen ist, in die Transmissionsformel des Vergleichspotentials einsetzen, um eine Näherung für die Penetrabilität zu erhalten. Tatsächlich entspricht dies der Methode, die ZHIRNOV [212] angegeben hat. Er führt darüberhinaus zusätzlich zum Vergleichspotential einen weiteren konstanten, additiven Term ein und legt ihn und die Höhe des Vergleichspotentials dadurch fest, daß beide gleich hoch sein sollen und am Gipfel die gleiche zweite Ableitung besitzen, um auch dort gute Übereinstimmung zu erzielen. Obwohl dieses Regime nicht vorrangiges Ziel unserer Arbeit war, kann man den Abbildungen 2.2 und 2.7 doch entnehmen, daß unsere Methode nahe des Gipfels sehr gut ist, wenn sich Barriere und Vergleichspotential dort hinreichend ähneln. Im Fall der Barriere (2.14) wäre ZHIRNOVS Theorie so nicht anwendbar. Auch für die klassisch verbotene Reflexion an einer Potentialrampe, die wir (nach meinem Kenntnisstand im Gegensatz zum Tunneln: neuartig) im nächsten Kapitel mittels der Vergleichspotentiale beschreiben werden, könnte man sich auf die Berechnung der Wirkungsintegrale bei $E = 0$ zurückziehen, was wir in der vorliegenden Arbeit aber nicht tun wollen.

Natürlich kann grundsätzlich jedes exakt lösbare Potential als Vergleichspotential dienen; etwa im Fall unsymmetrischer Barrieren kann man versuchen, ein unsymmetrisches Vergleichspotential, beispielsweise ein invertiertes MORSE-Potential³

³Das invertierte (für das normale siehe etwa [71], [125] oder ein beliebiges Lehrbuch der Quantentheorie) KRATZER-Potential $V(x) = \frac{A}{x} - \frac{B}{x^2}$ bietet sich nicht an, obwohl man die ex-

[4], [57] oder andere Potentialwalle, etwa [62], [156] zu benutzen. Wie wir gesehen haben, reicht es aber, die verallgemeinerten Amplituden und Phasen in den Anschluregeln zu kennen; daher bietet es sich an, das Potential am Gipfel durch einen konstanten Verlauf fortzusetzen, da dann die WKB-Funktionen in diesem Bereich exakt sind. Man kann dann sogar die normalerweise schlecht definierten überstrichenen Gröen in der Anschluregel (1.19) [und den darauf aufbauenden Formeln] berechnen. Mit den so gewonnenen Amplituden und Phasen kann man in die Formeln des ersten Kapitels eingehen und so T ermitteln.

Der antiklassische Limes kann an einer Potentialstufe auf zwei Arten erreicht werden, namlich durch das Eindringen der Welle am Fu, was Gegenstand dieses Kapitels war, oder durch Reflexion an der Oberkante. Letzteres wollen wir im folgenden Kapitel naher betrachten.

akte Losung (nach dem ublichen Abspalten der Asymptotik) durch KUMMERSche Funktionen angeben kann. Um die Transmission zu berechnen, mu man die Wellenfunktion nach ein- und auslaufender zerlegen. Weil die WKB-Bedingung (1.11) nahe am Ursprung nicht erfullt ist, ist dies bei endlicher Potentialstarke des zweiten Summanden problematisch. Die auf einer derartigen Zerlegung aufbauende Kontinuitatsgleichung (1.42) gilt erst fur $B \rightarrow \infty$. Siehe hierzu auch die den semiklassischen Grenzfall betreffenden Bemerkungen im funften Kapitel und die dort durchgefuhrte Berechnung der Transmission.

Kapitel 3

Klassisch verbotene Reflexion an einer Potentialstufe

It remains a challenge to find a general procedure for describing classically forbidden transmission or reflection when the probabilities are large, which is typically the case for energies near the top of a barrier or ramp

CÔTÉ, FRIEDRICH, and TROST: Reflection above potential steps

Die Reflexion von Wellen wird seit langem, aber auch und gerade in jüngster Zeit — und natürlich bei weitem nicht ausschließlich im Rahmen der Quantentheorie — untersucht; exemplarisch erwähnen wir hier einige Arbeiten [5], [6], [36], [41], [47], [54], [69], [110], [119], [126], [133] [146], [167], [172], [181], [189]; einen Überblick findet man beispielsweise im Lehrbuch von LEKNER [127].

In der Optik werden Reflexion und Transmission durch die FRESNELSchen Formeln beschrieben (siehe z.B. [185], Kap. 4.2); hier geht man davon aus, daß die Wellenlänge vor und hinter der Grenzfläche groß gegen deren Ausdehnung ist, was bei uns nicht immer erfüllt sein wird. Bei stationärer Rechnung entspricht dem Fall der Quantenmechanik senkrecht zur Einfallsebene linear polarisiertes Licht, siehe z.B. [151]. Somit können bei entsprechenden Profilen des Brechungsindex⁷ die hier entwickelten Verfahren auch dort eingesetzt werden. In der Optik hat man es dann sowohl mit einem gebrochenen, als auch einem reflektierten Strahl zu tun, in unserer quantenmechanischen Analogie entspricht dies einer „Aufspaltung“ der Trajektorie [27], [151]. Hier steht speziell die „nichtklassische“ Bahn, die aber für lange Wellen die wahrscheinlichere sein kann, im Mittelpunkt.

Der Fall der klassisch verbotenen Reflexion ist im Phasenraum dem Tunneln nicht unähnlich; grob gesagt entspricht dem Übergang $x \rightarrow -x'$ dort hier $p \rightarrow -p'$ [136], [137], jedoch gibt es keine klassischen Umkehrpunkte und mithin keine Zuordnungsregeln. Hier besteht das Anschlußproblem darin, r_{WKB} (1.38) zu finden. Da die WKB-Wellenfunktionen flußerhaltend sind, tritt klassisch verbotene Reflexion dort auf, wo die WKB-Methode versagt [159]. Diese Bereiche brauchen jedoch nicht so gut lokalisiert zu sein, wie dies für klassische Umkehrpunkte oft der Fall

ist, was es wiederum deutlich erschwert, einfache Näherungen für die Wellenfunktion anzugeben. Startet man mit der Randbedingung (1.39), und setzt diese naiv zu kleineren Werten von x fort, so schlägt sich das (glatte) Potential *nur* im Betrag der Phase der einlaufenden Welle nieder [156]; d.h. die naive Anwendung der WKB-Theorie kann in diesem Fall die Entstehung der reflektierten Welle nicht erklären, was sicher dazu beigetragen hat, daß dieses Phänomen zwar schon seit langem, aber immer noch von Interesse ist und mit einer Vielzahl an Methoden untersucht wurde und wird.

Der Grund für das Versagen der WKB-Theorie liegt in der Tatsache, daß glatte Potentiale nur transzendent klein, d.h. verschwindend in jeder Ordnung von \hbar , reflektieren (siehe etwa [110]), was die WKB-Theorie als TAYLOR-Entwicklung nach \hbar , siehe Gl.(1.4), nicht auflösen kann [19], [22]. Jedoch ist das Verhalten der Reflexionsamplituden nicht notwendigerweise wie $\exp[-C(E)/\hbar]$, siehe etwa [19], [20] und [147].

1991 haben H. GINGOLD und J. HU [92] darauf hingewiesen, daß die Bestimmung der Reflexionsamplitude mathematisch äquivalent zur Berechnung der Änderung der adiabatischen Invarianten $E(t)/\omega(t)$ eines Harmonischen Oszillators mit zeitabhängiger Frequenz $\omega(t)$ ist¹. Dieses sog. LORENTZ-Pendel wurde von EINSTEIN und LORENTZ auf der SOLVAY Konferenz 1911 diskutiert. Eine derartige adiabatische Invariante kann in jeder Ordnung des Störungsparameters konstant sein, was sie im vorliegenden Fall auch ist, und sich dennoch ändern [209]. Hier und in [165] findet man auch Literaturhinweise zu „*quite difficult*“ Untersuchungen dieses Problems; die uns interessierende Situation entspricht einer *großen* Änderung, hierfür suchen wir Näherungen. In den Fällen, wo die normale asymptotische Entwicklung die betreffenden, in der Regel exponentiell kleinen Terme nicht mehr auflösen kann, können z.B. sog. „hyperasymptotische“ Methoden eine Hilfe sein [21]. Deren Theorie und Handhabung ist jedoch mathematisch recht aufwendig; wir werden sie nicht benutzen. Für die Übergangsamplituden in einem adiabatisch getriebenen System gilt in enger Analogie ebenfalls, daß sie jenseits aller Ordnungen der Störungsrechnung sind [124], was es vielleicht sinnvoll macht, dort ähnlich wie hier vorzugehen.

Setzt man die WKB-Wellenfunktionen in die SCHRÖDINGER-Gleichung ein, so erhält man Summanden, die man als energieabhängiges Potential deuten kann. Dieser Zusatz verhält sich gerade so, daß das Gesamtpotential, zu dem die WKB-Wellenfunktionen die exakten Lösungen sind, reflexionsfrei² ist. Darauf aufbauend kann man eine Störungstheorie entwickeln [23], [136] und [149], die jedoch nur dann gut ist, wenn das Zusatzpotential und damit die Reflexion klein ist. Ist das Potential an einigen Stellen nicht glatt, so kommen die Hauptbeiträge zur Reflexion

¹Und zu weiteren Themen im Zusammenhang etwa mit dendritischem Wachstum und der KLEIN-GORDON-Gleichung.

²Reflexionsfreie Potentiale sind von potentieller Relevanz etwa in der Kommunikationstechnik [120]; man untersucht sie auch im Rahmen der supersymmetrischen Quantentheorie [188].

hauptsächlich von dort, und geeignetes Anstückeln der WKB-Funktionen liefert offensichtlich gute Resultate, wenn überall sonst WKB eine brauchbare Näherung darstellt; derartige Situationen und Vorgehensweisen werden auch bis heute immer wieder diskutiert [5], [6],[7], [19], [23], [127] und [159].

Wie im vorigen Kapitel schon erwähnt, kann der antiklassische Limes bei einer Potentialstufe auf zweierlei Arten verwirklicht werden, nämlich durch Reflexion an der Unter- bzw. Oberkante. Hier werden wir uns ausschließlich mit der zweiten Möglichkeit befassen.

Anhand einiger Beispiele zeigen wir, daß gängige Methoden gerade in dem von uns zu untersuchenden Fall kleiner Energien oder niedriger Stufen (damit kann die Wellenlänge sogar überall relativ groß sein) wenig erfolgversprechend sind und entwickeln eigene, die wir anhand numerischer Daten testen. Teile dieses Kapitels wurden bereits in [152] und [153] veröffentlicht.

3.1 Allgemeine Theorie

Die klassisch verbotene Reflexion an einer Potentialstufe ist für viele Teildisziplinen der Physik von Bedeutung; stellvertretend seien etwa die Austrittsarbeit von Elektronen aus Metallen und Halbleitern bzw. von Nukleonen aus Kernen, oder die Propagation elektromagnetischer Strahlung bei einer Änderung des Brechungsindex' genannt.

Ein erstes einfaches Beispiel ist die Reflexion an der scharfen Stufe (1.17) mit $E > V_0$, die in den Lehrbüchern der Quantenmechanik diskutiert wird. Da die WKB-Wellen hier bis auf konstante Phasen gleich den ebenen Wellen sind, findet man mit $k_1 := \sqrt{2mE}/\hbar$ und $k_2 := \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ (in diesem Kapitel werden mit $k_{1;2}$ die Wellenzahlen für $x \rightarrow \mp\infty$ bezeichnet) das den ebenen Wellen analoge Resultat (der Phasenreferenzpunkt ist $x_1 = x_m = 0$):

$$r_{WKB} = \frac{k_2 - k_1}{k_2 + k_1}; \quad (3.1)$$

die Unabhängigkeit dieses Ergebnisses von \hbar ist eine Folge des Sprungs im Potential, deren Analogon wir für $E < V_0$ schon in Gl.(1.20) gefunden und in den Gln.(1.54) und (2.16) verwendet haben. Jede endliche Wellenlänge ist groß verglichen mit der Skala, auf der sich das Potential ändert, was zu einer Reflexionsamplitude führt, die nur vergleichsweise langsam mit steigender Energie gegen den klassischen Wert Null geht. Für kleine Energien verhält sich die Reflexionswahrscheinlichkeit also wie $R \approx 1 - 4k_2/k_1$, während sie für große E proportional zu E^{-2} abfällt.

Ebenfalls exakt lösbar ist das invertierte Exponentialpotential [52], das wir schon im ersten Kapitel (3.2) für $E < 0$ als Beispiel für die Anwendung der verallgemeinerten Anschlußregeln besprochen haben:

$$V(x) = -V_0 \cdot \exp(-\alpha x), \quad V_0 > 0, \quad \alpha > 0; \quad (3.2)$$

die zugehörige Wellenfunktion ist durch eine BESSEL-Funktion gegeben [1], wobei $k_2 := \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ die Wellenzahl für $x \rightarrow \infty$ ist:

$$\Psi(x) = J_\nu(y), \text{ mit } \nu := -2ik_2/\alpha \text{ und } y := 2\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar\alpha} \exp(-\alpha x/2). \quad (3.3)$$

Gl.(1.67) liefert unter Vernachlässigung der Terme mit $K'/2K$ — sofern die WKB-Funktionen gute Näherungen sind, kann man bei Ableitungen nach dem Ort die Amplitude als konstant annehmen, wie schon im ersten Kapitel festgestellt wurde — und unter der Annahme, daß $y_m \gg 2k_2/\alpha$ gilt, zusammen mit der logarithmischen Ableitung der Wellenfunktion $z = \frac{\alpha}{2}y_m \tan\left(y_m + i\frac{k_2\pi}{\alpha} - \frac{\pi}{4}\right)$ eine Näherung für die Reflexionsamplitude ($x_1 = x_m$)

$$r_{WKB} = \exp\left[-\frac{2\pi k_2}{\alpha} + 2i\left(y_m - \frac{\pi}{4}\right)\right], \quad (3.4)$$

wo $y_m := 2\frac{\Delta}{\alpha} \exp\left[-\frac{\alpha x_m}{2}\right]$ und $\Delta^2 := \frac{2m}{\hbar^2}V_0$ sind. Die Reflexionswahrscheinlichkeit ist damit gegeben durch

$$R = \exp(-4\pi\frac{k_2}{\alpha}) \quad (3.5)$$

und es kann mit Hilfe der exakten Lösung leicht gezeigt werden, daß sie sogar exakt ist [153]. Im Fall kleiner Energien ist also die einsetzende Transmission wieder proportional zu k_2 : $R \approx 1 - 4\pi\frac{k_2}{\alpha}$; für große Energien ist die Abnahme exponentiell, also viel stärker, als im Fall der Stufe. Die Konsequenzen eines derart unterschiedlichen Verhaltens werden z.B. von SOMMERFELD und BETHE [196] diskutiert.

Mit dem im ersten Kapitel angegebenen Kriterium (1.11) kann man zeigen, daß sich der Bereich, wo WKB schlecht ist, umso weiter nach rechts erstreckt, je kleiner die Energien sind, um schließlich für $E \rightarrow 0$ nach $x \rightarrow \infty$ zu divergieren.

Anhand dieses Beispiels wollen wir nun eine Näherung für R besprechen, die z.B. bei LANDAU und LIFSCHITZ [125] angegeben wird. Man betrachtet für $x \rightarrow \infty$ eine nach rechts laufende WKB-Welle, die man analytisch entlang eines Bogens in der oberen komplexen Halbebene in den Bereich kleinerer x -Werte, wo WKB wieder gut sein soll, fortsetzt. Dabei wird der ebenfalls in der oberen Halbebene liegende komplexe Umkehrpunkt ζ , für den $E = -V_0 \exp(-\alpha\zeta)$ gilt, in großer Entfernung umfahren. Aufgrund der Mehrdeutigkeit der Wurzel ändert sich hierbei das Vorzeichen des Impulses; es entsteht also eine nach links laufende Welle. Der Koeffizient dieser Welle ist in dieser Näherung gleich der Reflexionsamplitude; hierbei nimmt man an, daß die Amplituden der einlaufenden und durchgelassenen Welle gleich sein sollen, was nur für kleine Reflexionswahrscheinlichkeiten R

berechtigt ist. Eine anschließende Deformation des Integrationsweges liefert dann folgende Formel:

$$R_{LL} = \exp \left[-\frac{4}{\hbar} \Im \int_x^\zeta p(z') dz' \right], \quad (3.6)$$

wobei sich die Integration von einem beliebigen Punkt x auf der reellen Achse zu dem Umkehrpunkt ζ erstreckt, der das größte R liefert, die Beiträge anderer Umkehrpunkte sind im Vergleich dazu exponentiell unterdrückt. In unserem Beispiel (3.2) sind die komplexen Umkehrpunkte gegeben durch $\zeta_n = -\frac{1}{\alpha} \left[i\pi(2n+1) + \ln \frac{E}{V_0} \right]$, wobei $n \in \mathbf{Z}$ gilt. Mit der Substitution $y := B \exp(-Mx/2)$ finden wir für das Wirkungsintegral (wir setzen die Integrationskonstante gleich Null):

$$\int \sqrt{A^2 + B^2 \exp(-Mx)} dx = -\frac{2}{M} \left[\sqrt{A^2 + y^2} - A \ln \frac{A + \sqrt{A^2 + y^2}}{y} \right] \quad (3.7)$$

was wir auch später noch benötigen werden. Damit wird, wenn wir vom Ursprung aus nach ζ_n auf einem RIEMANNschen Blatt integrieren,

$\Im \int_0^{\zeta_n} p(z') dz = -\frac{\pi}{\alpha} \sqrt{2mE}(2n+1)$, d.h. das Integral nimmt seinen kleinsten positiven Wert für $n = -1$ an. Dies entspricht dem komplexen Umkehrpunkt in der oberen Halbebene, der der reellen Achse am nächsten liegt. Wir finden also, daß diese Methode im Fall des Exponentialpotentials gerade das exakte Ergebnis liefert. In die Herleitung ging jedoch $R_{LL} \ll 1$ ein, außerdem wurde nur der Beitrag eines Umkehrpunktes berücksichtigt. Daher ist es nicht zu erwarten, daß dieses Zusammentreffen von exaktem Resultat und Näherung allgemeiner Natur ist. Vielmehr muß normalerweise der Exponent in (3.6) hinreichend groß gegen Eins sein [125], damit ist aber natürlich R_{LL} klein gegen Eins. Der Vorfaktor vor dem Exponenten in (3.6) wird bei [125] ausdrücklich als gleich Eins angegeben, was in unserem Beispiel bestätigt wird und im Falle, daß die Wellenzahl für $x \rightarrow \infty$ gegen Null geht, unmittelbar klar wäre; er ist Gegenstand einer interessanten Diskussion, siehe [22] und [136].

Ein weiteres exakt lösbares Potential ist die sogenannte WOODS-SAXON-Stufe [71], [125], [127]:

$$V(x) = V_0/[1 + \exp(-\alpha x)], \quad V_0 > 0, \quad \alpha > 0, \quad (3.8)$$

die beispielsweise in der Kernphysik und der Theorie der kondensierten Materie, etwa für die Untersuchung kritischer Phänomene [36] oder des Elektronengases, von großer Bedeutung ist.

Wir definieren wieder k_2 als Wellenzahl für $x \rightarrow \infty$ [wo dieses Potential einen anderen Grenzwert annimmt als (3.2)]: $k_2 := \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$; $k_1 := \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ ist diejenige für $x \rightarrow -\infty$. Die entsprechende SCHRÖDINGER-Gleichung kann man durch

Substitution und Abspalten der Asymptotik auf eine hypergeometrische Differentialgleichung zurückführen. Die so gewonnene exakte Wellenfunktion ergibt eine Reflektionsamplitude

$$r = \frac{\Gamma\left[\frac{2i}{\alpha}k_1\right] \Gamma\left[-\frac{i}{\alpha}(k_1 + k_2)\right] \Gamma\left[-\frac{i}{\alpha}(k_1 + k_2) + 1\right]}{\Gamma\left[-\frac{2i}{\alpha}k_1\right] \Gamma\left[\frac{i}{\alpha}(k_1 - k_2)\right] \Gamma\left[\frac{i}{\alpha}(k_1 - k_2) + 1\right]}, \quad (3.9)$$

(die man mittels Gl.(1.41) auf r_{WKB} umrechnen kann) und damit einen Reflexionskoeffizienten

$$R = \left(\frac{\sinh\left[\frac{\pi}{\alpha}(k_1 - k_2)\right]}{\sinh\left[\frac{\pi}{\alpha}(k_1 + k_2)\right]} \right)^2. \quad (3.10)$$

Für $\alpha \rightarrow \infty$ wird diese Rampe immer schmaler; der Wert für R geht in den der scharfen Stufe über, siehe Gl.(3.1). Für große $[k_1 - k_2]/\alpha$ reproduziert sich das Ergebnis des invertierten Exponentialpotentials. Wenn k_2 klein wird, gilt $R \approx 1 - 4\frac{\pi}{\alpha}k_2 \coth\left(\frac{\pi}{\alpha}k_1\right)$. Die oben schon beschriebene Näherung liefert $R_{LL} = \exp\left[-\frac{4\pi}{\alpha}k_2\right]$ [22], was dem Ergebnis des Exponentialpotentials bzw. dem Limes $\hbar \rightarrow 0$ in Gleichung (3.10) entspricht. Während der exakte Wert von R im Falle $k_1 = k_2$ verschwindet, hängt R_{LL} gar nicht von k_1 ab. Dies läßt den Schluß zu, daß obige Näherung besonders bei niedrigen Stufen, wo die Reflexion nicht nur im Bereich des exponentiellen Schwanzes des Potentials stattfindet, versagt. Davon abgesehen, daß diese Methode die Kenntnis der Lage und Struktur der Umkehrpunkte und Singularitäten in der komplexen Ebene voraussetzt, was für kompliziertere Potentialformen eine nicht unerhebliche Erschwernis darstellt, werden wir sie, da wir uns besonders für den Fall $R \approx 1$ interessieren, für den sie aufgrund ihrer Herleitung ungeeignet erscheint, nicht mehr benutzen. Eine weitere Methode, die eine vergleichsweise komplizierte Integration im Komplexen beinhaltet, wurde von HOLSTEIN [106] angegeben; sie liefert für die WOODS-SAXON-Stufe das gleiche von k_1 unabhängige Resultat wie diejenige aus LANDAU-LIFSCHITZ, d.h. auch sie wird speziell bei niedrigen Stufen versagen. Moderne Darstellungen unter Zuhilfenahme komplexer Methoden und die Auswirkungen der Struktur der Umkehrpunkte sind beispielsweise [20] und [42]. Darüberhinaus findet man im Lehrbuch von LEKNER [127] folgenden naheliegenden Ansatz für eine Störungstheorie beschrieben: ausgehend von einer scharfen Stufe betrachtet man die Differenz aus tatsächlichem Potential und Stufe als Störung. In niedrigster Näherung bekommt man so die Reflektivität (3.1), und speziell im Fall kleiner, endlicher Energien, niedriger und scharfer Stufen, d.h. für lange Wellen, ist diese Näherung recht gut, wie unmittelbar aus der Idee hervorgeht und man sich anhand Abb. 3.3 (unten) klarmachen kann. Für eine sanfte Stufe hat diese nullte Näherung sicher falsche funktionale Abhängigkeiten (von \hbar und E) [19], wie wir schon betont haben, was einen insgesamt interessanten Aspekt dieser Näherung darstellt. Bei einer

WOODS-SAXON-Stufe als nullter Näherung wäre dieser Effekt nicht wichtig, und es wird später klar werden, welche (energieabhängigen!) Breiten man sinnvollerweise einsetzt, wenn man diese als Ausgangspunkt einer Störungstheorie benutzen wollte.

Praktisch und historisch von Bedeutung ist die sog. BREMMER-Methode; hier setzt man WKB-Wellenfunktionen mit ortsabhängigen Amplituden $b(x)/\sqrt{p(x)}$ in die SCHRÖDINGER-Gleichung ein und löst die entstehenden Differentialgleichungen approximativ [22]. Das Ergebnis ist

$$R_{Bremmer} = \left| \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{p'(x)}{2p(x)} \exp[(2i/\hbar) \int_0^x p(x') dx'] \right|^2; \quad (3.11)$$

es kann als Reflexion an scharfen Stufen, in die man sich das Potential aufgeteilt denkt, interpretiert werden. BAHAR [13] hat darauf hingewiesen, daß diese Näherung ungeeignet ist, wenn die Kopplung der beiden WKB-Funktionen und damit die Reflexion groß ist.

Eine andere Möglichkeit besteht in der approximativen Berücksichtigung der in Gl.(1.3) vernachlässigten SCHWARZschen Ableitung (1.10) im Sinne einer Näherung: Setzt man die WKB-Wellenfunktionen in die SCHRÖDINGER-Gleichung ein, so erhält man ein orts- und energieabhängiges Zusatzpotential, und zu *dieser* („homogenen“) SCHRÖDINGER-Gleichung sind die WKB-Wellenfunktionen die *exakten* Lösungen. Analog der BORNschen Näherung betrachtet man das Produkt dieses Zusatzpotentials mit der Wellenfunktion als Inhomogenität der tatsächlichen SCHRÖDINGER-Gleichung und beschafft sich mittels der Lösungen der homogenen Gleichung beispielsweise durch Variation der Konstanten die entsprechende Integralgleichung. Bis hier gilt alles noch exakt. Als nullte Näherung werden nun die WKB-Wellen eingesetzt, was eine Approximation der Reflexionswahrscheinlichkeit liefert. Derartige Wege wurden beispielsweise von MIGDAL [149], BESTLE, SCHLEICH und WHEELER [23] und zuletzt von MAITRA und HELLER [136] scheinbar unabhängig voneinander besprochen. Hier ist das Resultat in der Form von MAITRA und HELLER:

$$R_{MH} = \frac{m^2}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{V(x) - V_{\text{eff}}(x, E)}{p(x)} \exp[(2i/\hbar) \int^x p(x') dx'] \right|^2, \quad (3.12)$$

wo $V_{\text{eff}}(x, E)$ durch

$$V_{\text{eff}}(x, E) = V(x) - \hbar^2 \left[\frac{5}{32m} \left(\frac{V'(x)}{E - V(x)} \right)^2 + \frac{V''(x)}{8m[E - V(x)]} \right] \quad (3.13)$$

gegeben ist. Es ist nicht überraschend, daß die Hauptbeiträge zu den Integralen in (3.11) und (3.12) von den Bereichen im Ortsraum herrühren, wo, grob gesagt, WKB eine schlechte Näherung ist. Gerade hier die WKB-Wellenfunktionen als

nullte Näherung zu benutzen, wird insbesondere dann bedenklich, wenn entweder der Fehler in der Wellenfunktion oder das Integrationsintervall groß werden. In den von uns untersuchten Fällen wird beides zutreffen. Um eine Vorstellung zu bekommen, betrachten wir wieder die Anwendung dieser Theorien auf ein Potential mit exponentiellem Schwanz, d.h. für $x \rightarrow \infty$ soll (3.2) gelten und darüberhinaus soll die Energie verschwinden $E = 0$. Dann verhält sich p'/p wie eine Konstante, und $R_{Bremmer}$ divergiert aufgrund der Beiträge großer x . In der Störungstheorie divergiert sogar der Integrand von R_{MH} exponentiell. Die numerischen Ergebnisse von MAITRA und HELLER zeigen die überragende Güte der BREMMER-Methode, man erkennt aber deutlich das Versagen beider Formeln für kleine Energien.

Die besprochenen gängigen Methoden eignen sich also meist nicht im Fall $R \approx 1$; sie gehen von einer schwachen Reflexion aus; wir wollen jedoch gerade den gegenteiligen Fall, in dem Reflexion dominant ist, beschreiben.

Wir haben schon darauf hingewiesen, daß für die verbotene Reflexion bei niedrigen Energien der Schwanz des — genügend hohen und glatten — Potentials wichtig wird, weil dies der Bereich ist, in dem WKB versagt, also Reflexion stattfindet. Bisher haben wir nur Potentiale mit exponentiellem Verhalten betrachtet. Jedoch treten in vielen praktischen Fällen Potentiale mit einer potenzförmigen Asymptotik auf;

$$V_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\beta_n^{n-2}}{x^n}, \quad \beta_n > 0, \quad n \geq 3, \quad (3.14)$$

weswegen sie in diesem Zusammenhang von CÔTÉ, FRIEDRICH und TROST untersucht wurden [52]. Die Änderung der DE BROGLIE-Wellenlänge bei verschwindender Energie ist

$$\frac{1}{2\pi} \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| = \left| \frac{dK^{-1}}{dx} \right| = \frac{n}{2} \left(\frac{\beta_n}{x} \right)^{1-\frac{n}{2}}, \quad (3.15)$$

so daß WKB für hinreichend kleine Werte von x eine brauchbare Näherung darstellt [125], während sie für große x beliebig schlecht wird. Mit der Skalierung $\rho := k_2 x$, $k_2 := \sqrt{2mE}/\hbar$ erhält man die reduzierte SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\frac{d^2 \Psi(\rho)}{d\rho^2} + \left[1 + \frac{(k_2 \beta_n)^{n-2}}{\rho^n} \right] \Psi(\rho) = 0, \quad (3.16)$$

aus der man ablesen kann, daß $k_2 \beta_n$ der wesentliche Systemparameter ist. Für endliche Energien $k_2 > 0$ wird WKB auch bei $x \rightarrow \infty$ wieder besser, weil hier das Potential konstant wird. Es gibt keine bekannten analytischen Lösungen für Potentialstufen mit dem in Gleichung (3.14) angegebenen asymptotischen Verhalten [52]. Man kann jedoch die SCHRÖDINGER-Gleichung des homogenen Potentials (3.14) für $E = 0$ lösen [1]:

$$\Psi_1(x) = \sqrt{x} J_\nu(y), \quad \Psi_2(x) = \sqrt{x} J_{-\nu}(y), \quad (3.17)$$

mit $\nu := 1/(n-2)$ und $y := \frac{2}{n-2} \left(\frac{\beta_n}{x}\right)^{-1+n/2}$. Für große $x \rightarrow \infty$ gilt dann

$$\Psi_1(x) = c_1 + O(x^{2-n}), \quad \Psi_2(x) = -c_2 x + O(x^{3-n}), \quad (3.18)$$

mit

$$\begin{aligned} c_1 &= (n-2)^{1/(2-n)} \frac{\sqrt{\beta_n}}{\Gamma\left(1 + \frac{1}{n-2}\right)} \quad \text{und} \\ c_2 &= (n-2)^{1/(n-2)} \frac{1}{\sqrt{\beta_n} \Gamma\left(1 - \frac{1}{n-2}\right)}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Bis auf Terme der $o(k_2)$ geht folgende Überlagerung für große $x \rightarrow \infty$ in eine rechtslaufende ebene Welle über:

$$\Psi(x) = \frac{1}{c_1} \Psi_1(x) + \frac{ik_2}{c_2} \Psi_2(x) \stackrel{x \rightarrow \infty}{\sim} 1 + ik_2 x, \quad (3.20)$$

während sie für kleine x/β_n folgende Form annimmt:

$$\Psi(x) \sim \sqrt{\frac{x}{y}} \left[\cos\left(y - \frac{\pi}{4} - \frac{\nu\pi}{2}\right) + ik_2 B \cos\left(y - \frac{\pi}{4} + \frac{\nu\pi}{2}\right) \right], \quad (3.21)$$

mit $B = \frac{c_1}{c_2}$. Wir werden konkret Potentiale betrachten, die zwar einen homogenen Schwanz besitzen, ansonsten aber endlich bleiben; dies erlaubt es uns, auf eine Diskussion der mit stark singulären Potentialen verbundenen physikalischen Schwierigkeiten in der Nähe des Ursprungs zu verzichten. Damit die oben entwickelte Theorie sinnvoll verwendet werden kann, muß sich der Bereich, in dem das Potential als homogen betrachtet werden kann, weiter nach links erstrecken, als derjenige, in dem die WKB-Theorie versagt. Unter diesen Umständen kann man also einen Punkt $x_m = x_1$ finden, an dem sowohl die Näherung des homogenen Potentials, als auch die WKB-Methode gut sind. Hier berechnet man die logarithmische Ableitung der Wellenfunktion (3.21) und setzt das Ergebnis in (1.67) ein. Es wird also für hinreichend tiefe und glatte Potentiale der besprochenen Asymptotik das — prinzipiell exakte — Schwellenverhalten beschrieben durch

$$\arg(r_{CFT}) = \frac{4}{n-2} \left(\frac{\beta_n}{x_m}\right)^{(n/2)-1} - \left(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{n-2}\right), \quad (3.22)$$

und

$$R_{CFT} = 1 - \left(\frac{1}{n-2}\right)^{\frac{2}{n-2}} \frac{4\pi\beta_n}{\Gamma\left(\frac{1}{n-2}\right) \Gamma\left(1 + \frac{1}{n-2}\right)} k_2. \quad (3.23)$$

Eine numerische Rechnung des Autors am Beispiel $n = 2.66\dots$ hat gezeigt, daß diese Formel auch für Potentiale mit $2 < n < 3$ für sehr kleine $\beta_n k_2$ verwendet

werden kann, was aufgrund ihrer Herleitung nicht unmittelbar klar war. In den nun folgenden Abschnitten werden wir immer wieder auf den Ausdruck (3.23) zurückgreifen, selbst wenn aufgrund seiner Herleitung und des daraus resultierenden Gültigkeitsbereiches klar ist, daß wir ihn damit manchmal etwas überstrapazieren. Jedoch sollten hier auch die Grenzen dieses Verfahrens diskutiert werden, um zu zeigen, wo *neue*, vom Autor entwickelte Methoden gewinnbringend eingesetzt werden können. Im nächsten Kapitel werden wir R_{CFT} mit denselben vom Potentialschwanz abhängigen Größen wie eventuell vorhandene schwellennahe Zustände parametrisieren und gelangen so zu einer möglichst einheitlichen Beschreibung schwellennaher Phänomene in diesem Bereich.

3.2 Methode der Vergleichspotentiale

Wie im vorigem Kapitel wollen wir nun eine Näherung basierend auf der Methode der Vergleichspotentiale entwickeln; als ersten Kandidaten wählen wir die WOODS-SAXON-Rampe, Gl.(3.8). Im Gegensatz zur analogen Tunneltheorie haben wir hier keine klassischen Umkehrpunkte, die uns sagen, wo unsere korrespondierenden Integrationsgrenzen liegen, daher verschieben wir das zu untersuchende Potential so entlang der x -Achse, bis z.B. der Punkt maximaler Steigung bei $x = 0$ liegt, in Analogie zur WOODS-SAXON-Rampe. Man könnte aber etwa auch fordern, daß das Integral über die Differenz der Potentiale gerade verschwindet. Weil aber die erste Möglichkeit normalerweise rechentechnisch deutlich ökonomischer ist und wir darüberhinaus auch ein Vergleichspotential betrachten, das nicht stufenförmig ist, wählen wir die zuerst genannte. Dann müssen wir noch den Nullpunkt der Energieskala und die Potentialhöhe V_0 so festlegen, daß die beiden asymptotischen Wellenzahlen $k_{1;2}$ beider Potentiale gleich sind. Diese Transformationen ändern selbstverständlich nichts an der Reflexionswahrscheinlichkeit. Der einzige freie Parameter in unserem Vergleichspotential ist somit dessen Breitenparameter, die sogenannte Vergleichsbreite α .

Wir nennen die exakte Lösung des Vergleichsproblems wieder $X(x)$, und gehen mit dem Ansatz $\varphi = [dS/dx]^{-1/2} X(S)$ in die SCHRÖDINGER-Gleichung, womit wir nach Vernachlässigen höherer Ableitungen von S erhalten

$$[S']^2 \frac{2mE}{\hbar^2} \left[1 - \frac{A}{1 + e^{(-\alpha S)}} \right] = K^2(x), \quad (3.24)$$

mit $A := V_0/E$. Die Integration dieser Gleichung sollte uns den Wert α liefern, aber da wir keine klassischen Umkehrpunkte, d.h. keine korrespondierenden Nullstellen der Integranden haben, fehlen offensichtliche Randbedingungen. Wir vermeiden die Divergenz der Integrale dadurch, daß wir die asymptotischen Werte der Wellenzahlen jeweils von den Integranden abziehen, was eine in der semiklassischen

Streutheorie gebräuchliche Vorgehensweise darstellt [151]. Dies liefert

$$k_1 \int_{\hat{S}}^{\hat{S}} dS \sqrt{y} - \int_0^{\hat{x}} k_2 dx - \int_{\check{x}}^0 k_1 dx = \int_{\check{x}}^{\hat{x}} K(x) dx - \int_0^{\hat{x}} k_2 dx - \int_{\check{x}}^0 k_1 dx, \quad (3.25)$$

wo $y := 1 - A [1 + e^{(-\alpha S)}]^{-1}$. Die Durchführung der Grenzwerte $\hat{x}, \hat{S} \rightarrow \infty$ und $\check{x}, \check{S} \rightarrow -\infty$ (für $|x|, |S| \rightarrow \infty$ gilt $S' = 1$) gibt einen Ausdruck³ für die Vergleichsbreite α :

$$\alpha = \frac{k_1 \left[(1 + \sqrt{1-A}) \ln \left| \frac{1-\sqrt{1-A}}{1+\sqrt{1+A}} \right| - \ln \frac{A}{4} - \sqrt{1-A} \ln \frac{A}{4-4A} \right]}{\int_{\check{x}}^{\hat{x}} K(x) dx - \hat{x}k_2 + \check{x}k_1}, \quad (3.26)$$

den wir in Gl.(3.10) einsetzen können, um eine Näherung für R zu erhalten.

Ein weiteres Vergleichspotential für die Niederenergie-Streuung über eine Barriere ist, bei ausreichend hoher Barriere, durch das invertierte Exponentialpotential, Gl.(3.2), gegeben. Hierzu schieben wir wieder unser zu untersuchendes Potential entlang der x -Achse und zwar soweit, bis das Gebiet, an dem Reflexion im wesentlichen stattfindet, bei $x > 0$ liegt. Den Nullpunkt der potentiellen Energie nehmen wir für $x \rightarrow \infty$ an. Damit ist $U(x)$, das zu untersuchende Potential, definiert, und es ist $k_2 = \sqrt{2mE}/\hbar$ die Wellenzahl für große positive Werte von x .

Wir nennen die exakte Lösung des Exponentialpotentials wieder $X(x)$ und setzen $\varphi = [dS/dx]^{-1/2} X(S)$ in die SCHRÖDINGER-Gleichung für $U(x)$ ein:

$$S' \sqrt{k_2^2 + \Delta^2 e^{-\alpha S}} - k_2 = K(x) - k_2, \quad (3.27)$$

mit $\Delta^2 := \frac{2m}{\hbar^2} V_0$. Um sowohl die Potentiale, als auch die Ansatz-Wellenfunktionen (an die WKB) am Punkt x_m aneinander anzupassen, fordern wir, daß dort beide Potentiale den gleichen Wert haben sollen: $v^2(x_m) := -\frac{2m}{\hbar^2} U(x_m) = \Delta^2 e^{-\alpha S_m}$, und für diesen Punkt soll weiter gelten $x_m = S_m$. Eine Integration liefert dann folgenden Wert für die Vergleichsbreite α :

$$\alpha = \frac{k_2 \left[-2 - 2 \ln \frac{v(x_m)}{2k_2} + 2 \frac{K(x_m)}{k_2} + \ln \frac{K(x_m) - k_2}{K(x_m) + k_2} \right]}{\int_{x_m}^{\infty} [K - k_2] dx}. \quad (3.28)$$

Die Reflexionsamplitude r_{WKB} für ein inverses Exponential-Potential wurde schon besprochen, Gl.(3.4); hier und in die entsprechende Reflexionswahrscheinlichkeit $R = \exp(-4\pi \frac{k_2}{\alpha})$ kann man nun den oben bestimmten Wert von α einsetzen. In den Fällen, in denen diese Näherung brauchbar ist, ist damit das Anschlußproblem für die Reflexion über einer Stufe gelöst.

³Die Bestimmung der Stammfunktion des Wirkungsintegrals der WOODS-SAXON-Stufe führt man günstigerweise über die Substitution mit obigem y und anschließender Partialbruchzerlegung aus.

3.3 Vergleich der Methoden

Die Abb. 3.2 zeigt die Transmission als Funktion der kinetischen Energie ($x \rightarrow \infty$) $E_{\text{kin}; \text{infinity}} := \hbar^2 k_2^2 / (2m)$ für die folgende Potentialstufe, die selbst in Abb. 3.1 dargestellt ist,

$$U(x) = \frac{U_0}{2} \frac{axe^{a^2x^2}}{[1 + (axe^{a^2x^2})^2]^{0.5}} - \frac{U_0}{2}, \quad (3.29)$$

wo wir $U_0 = a = 1$ gewählt haben; man sieht die Resultate für das WOODS-SAXON-Vergleichspotential (langgestrichelt) und das Exponentielle (gepunktet). In diesem Fall ist selbstverständlich weder die Formel (3.23) für potenzartige, noch

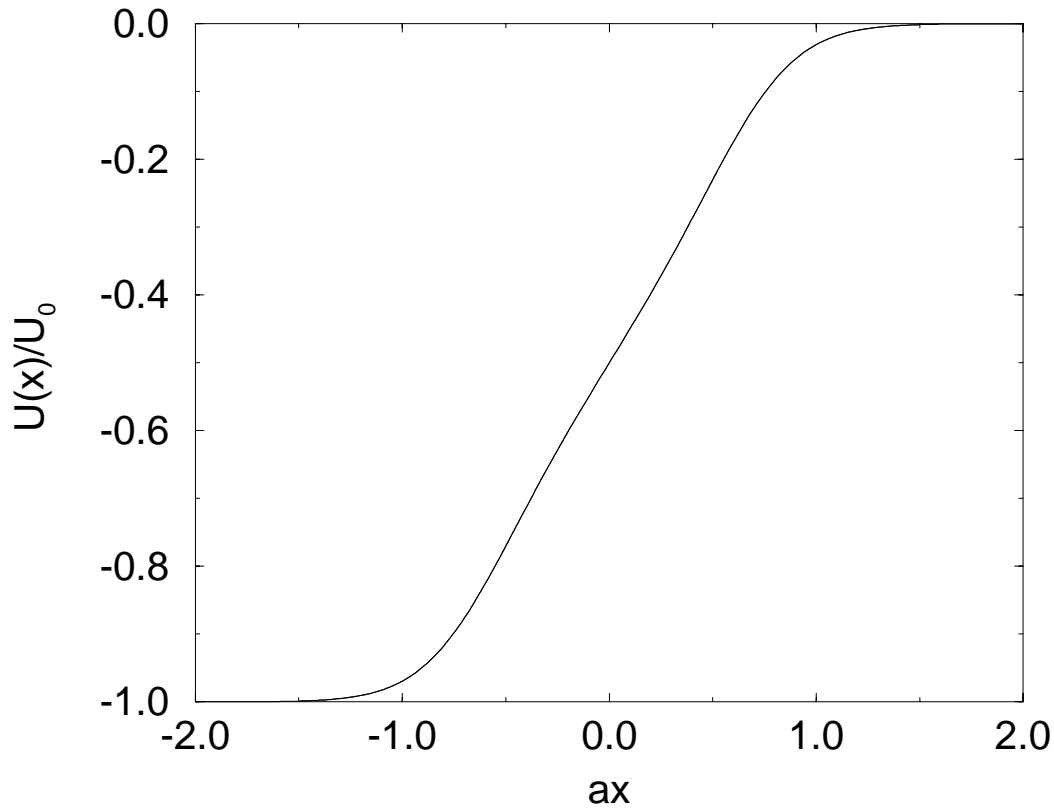


Abbildung 3.1: Die Stufe (3.29).

die für *einfache* exponentielle Schwänze, Gl. (3.4), überhaupt anwendbar, was

die Allgemeinheit des auf der Vergleichsmethode aufbauenden Verfahrens demonstriert. Die Übereinstimmung mit dem numerisch exaktem Ergebnis ist exzellent für lange Wellen, und gibt sehr gute Näherungen für höhere Energien. Besonders die auf der WOODS-SAXON-Stufe basierende Näherung liefert eine über viele Größenordnungen der Energie beeindruckende Approximation. Im doppeltlogarithmischen Bild erkennt man, daß sich die Transmission an der Schwelle $E = 0$ proportional zu k_2 verhält, was wir schon bei den exakt lösbaren Fällen analytisch gefunden haben. Wie im vorigen Kapitel sind die entscheidenden Größen die Höhe V_0 und die Vergleichsbreite α .

In Abb. 3.3 sieht man einen Vergleich der unterschiedlichen Methoden für eine Potentialrampe der Form

$$U(x) = -\frac{U_0}{1 + [\ln(1 + \exp(ax))]^{12}}. \quad (3.30)$$

Für $ax \rightarrow \infty$ verhält sie sich wie $-\frac{U_0}{(ax)^{12}}$; für $ax \rightarrow -\infty$ wie $-\frac{U_0}{1 + \exp(12ax)}$, so daß man hier — im Gegensatz zum Vergleichspotential und dem obigen Beispiel — strenggenommen nicht von Punktsymmetrie sprechen kann. Mit zunehmenden a wird diese Rampe der scharfen Stufe (1.17) immer ähnlicher.

Im oberen Bild von Abb. 3.3 wurde für die Höhe und Breite der Wert Eins gewählt: $U_0 = a = 1$, darüberhinaus war $z = x + 0.5321904\dots$, um den Punkt maximaler Steigung auf den Ursprung zu legen. Dieses Potential hat einen homogenen Schwanz, was es erlaubt, R_{CFT} zu bestimmen, aber es ist nicht tief genug, um damit gute Näherungen zu liefern. Das Exponentialpotential gibt in diesem Parameterbereich gute Resultate und die Übereinstimmung zwischen numerisch exakter Lösung und der WOODS-SAXON-Approximation ist exzellent und auch bei höheren Energien anwendbar, wo die auf homogenen Potentialschwänzen basierende Formel (3.23) aufgrund ihrer Herleitung vollständig versagt.

Das untere Bild in Abb. 3.3 zeigt ebenfalls die Reflexion an der Stufe (3.30), jedoch als Funktion der Breite a bei $E_{\text{kin}; \text{infinity}} := \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = 0.001$ und $U_0 = 1$. Das Potential wurde so entlang der x -Achse verschoben, d.h. $z = z(a)$ entsprechend gewählt, daß der Punkt maximaler Steigung auf dem Ursprung liegt. Je größer a ist, desto schmaler ist die Stufe. Für $a \rightarrow \infty$ konvergieren sowohl die exakte Lösung als auch die WOODS-SAXON-Approximation schnell gegen den (natürlich von a unabhängigen) Wert der scharfen Stufe, (3.1), $R = \text{const.} \approx 0.88$. Sanftere Rampen haben erwartungsgemäß eine kleinere Reflektivität zur Folge; dieser Übergang wird von der WOODS-SAXON-Approximation auch schön wiedergegeben. Die Näherungen, die von einer unendlich hohen Stufe ausgehen, also (3.23) und (3.28), konvergieren folgerichtig gegen den hier falschen Wert $R = 1$, die endliche Höhe darf also nicht ignoriert werden.

Abb. 3.4 veranschaulicht ebenfalls die Transmissionwahrscheinlichkeit an der Potentialstufe (3.30), jedoch als Funktion der Höhe U_0 mit den Parametern $a = 1$, $z = x + 0.5321904\dots$ und $E = 0.001$. Wenn U_0 zu klein, d.h. die Rampe niedrig

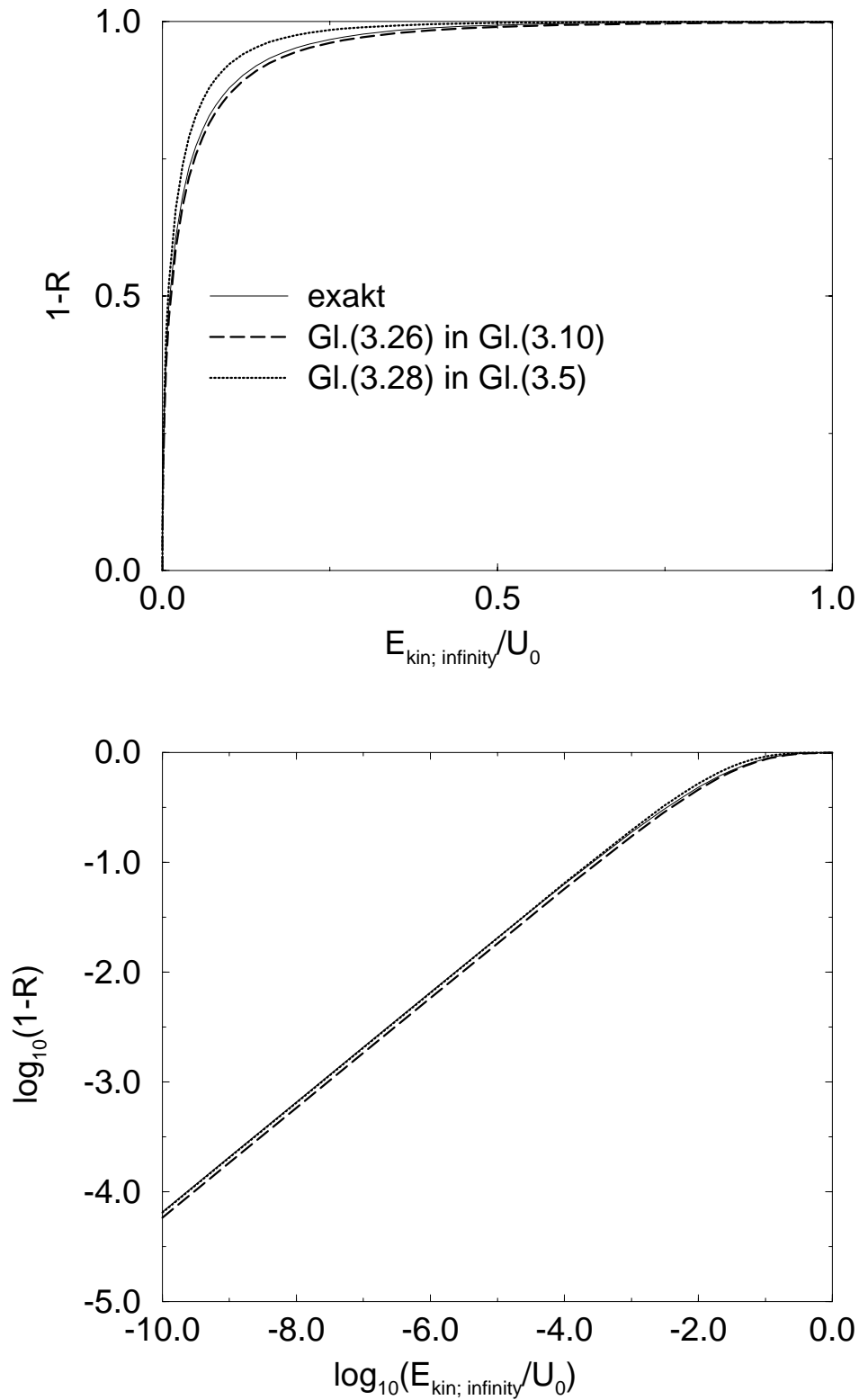


Abbildung 3.2: Reflexion an der Stufe (3.29): Transmission $1 - R$ vs. $\frac{\hbar^2 k_2^2}{2mU_0}$, d.h. die asymptotische kinetische Energie in Einheiten der Stufenhöhe. $U_0 = a = 1$. Links ist man knapp über der Rampe; rechts bei einer Energie, die der doppelten Stufenhöhe entspricht.

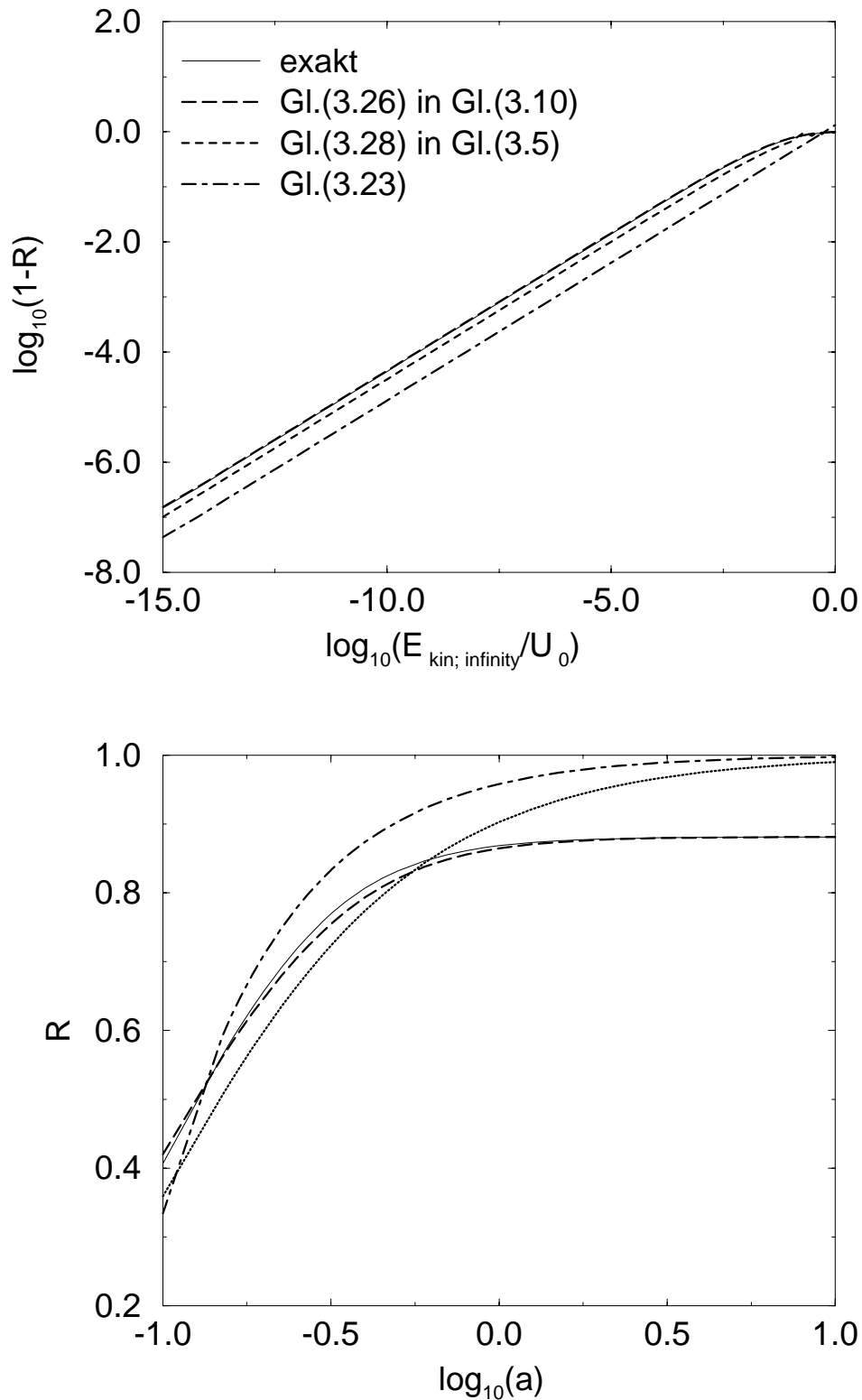


Abbildung 3.3: Reflexion an der Stufe (3.30): Transmission vs. asymptotische kinetische Energie in Einheiten der Stufenhöhe, $U_0 = a = 1$ (oben); bzw. Reflexion vs. Breite a bei $U_0 = 1$, $E_{\text{kin; infinity}} = 0.001$, für die scharfe Stufe ($a \rightarrow \infty$) ist nach Gl.(3.1) $R \approx 0.88$ (unten).

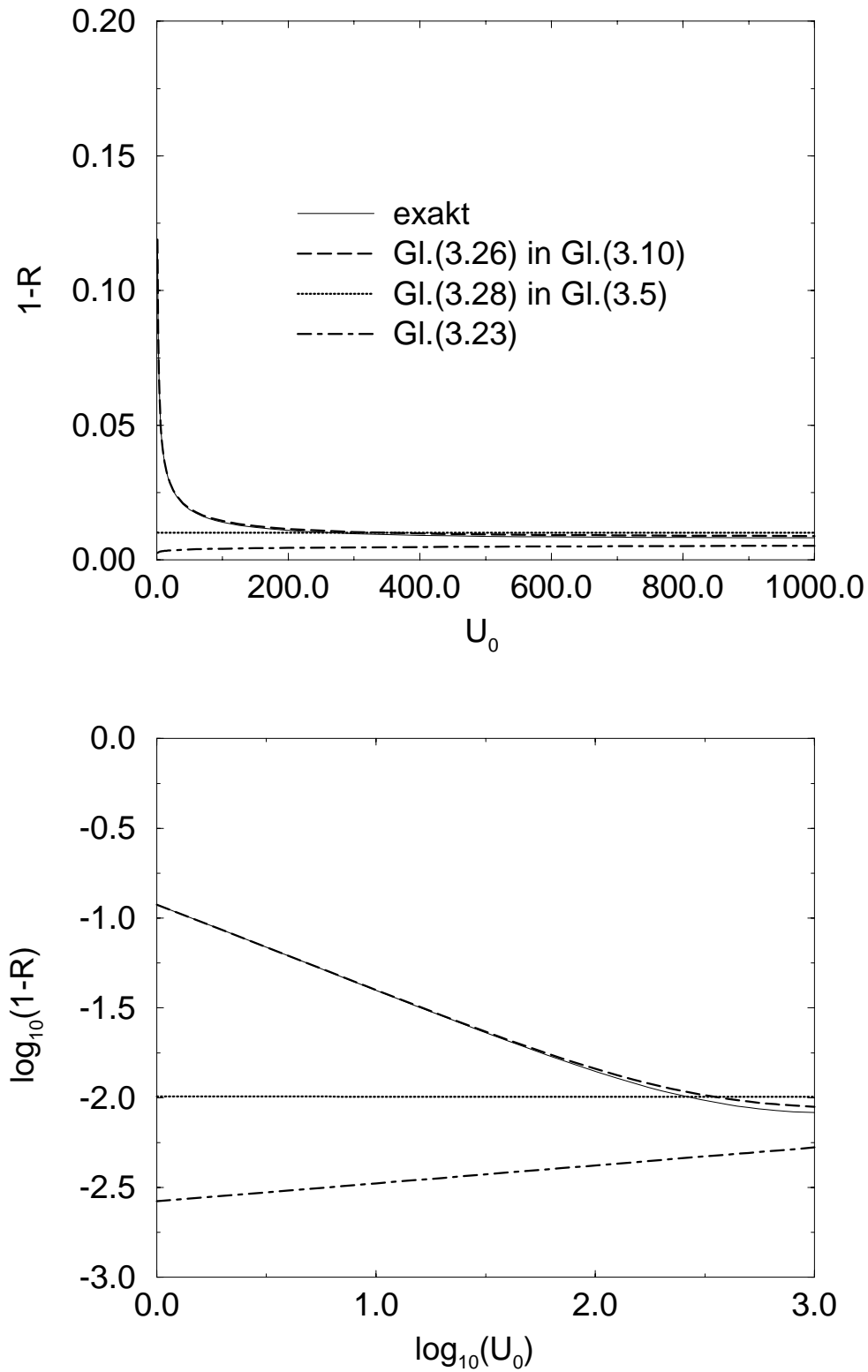


Abbildung 3.4: Reflexion an der Stufe (3.30): Transmissionswahrscheinlichkeit vs. Potentialhöhe, $a = 10$, $z=x+0.05321904\dots$, $E = 0.001$.

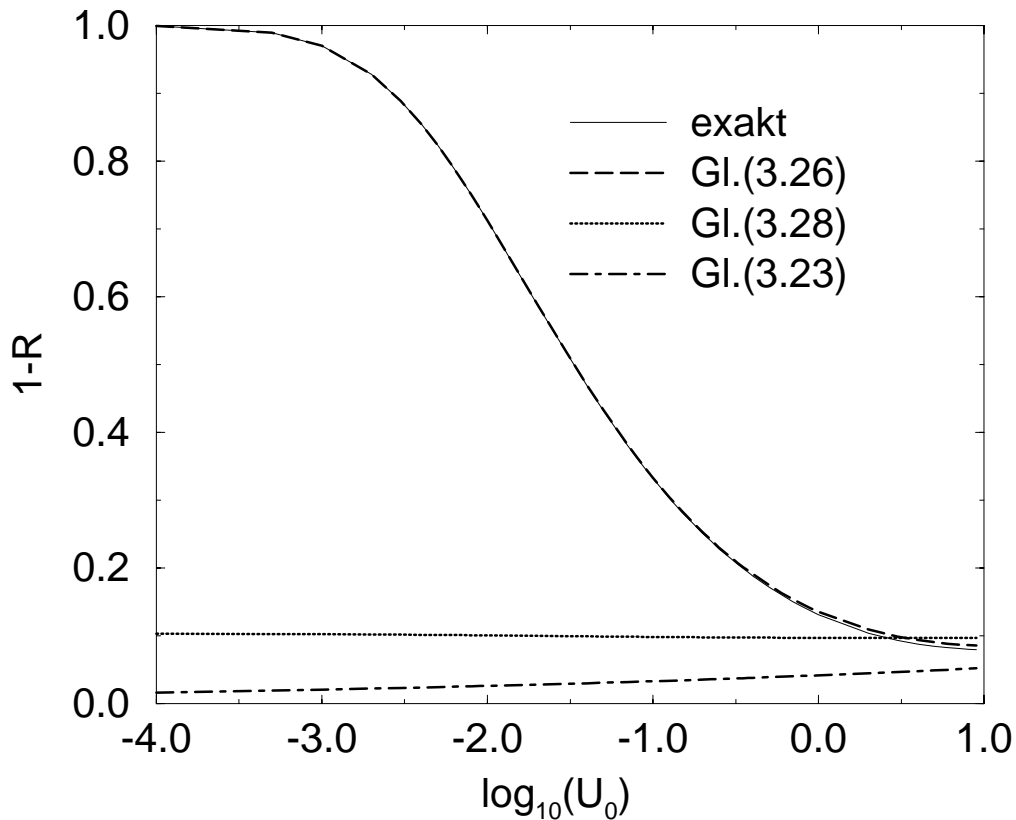


Abbildung 3.5: Transmission vs. Potentialhöhe; $a = 1$, $z=x+0.5321904\dots$, $E = 0.001$.

ist, sind die Methoden, die nur den Potentialschwanz berücksichtigen, natürlich nicht geeignet. Dies entspricht insofern dem Langwellenlimes, als die Wellen hier während des gesamten Stufenverlaufs lang sein können. Hier ist wieder die auf der WOODS-SAXON-Stufe aufbauende Näherung von exzellenter Güte. Wenn die Stufenhöhe zunimmt, werden auch die anderen Methoden besser; man sieht aber, daß dies bei der Approximation durch einen homogenen Schwanz, Gl.(3.23), nur recht langsam erfolgt. Allerdings zeigt das untere Bild, daß sich bei extrem hohen Stufen auch die WOODS-SAXON-Approximation verschlechtert (3.26): wenn man nur den homogenen Schwanz zu betrachten braucht, dann sagen die Gln.(3.14) und (3.23) eine Steigung von $1/(12 - 2) = 0.1$ im unteren Bild voraus; welche die strichpunktierte Linie auch aufweist. Dem WOODS-SAXON-Potential und dem Exponentialpotential entspricht dann die Potenz ∞ , d.h. verschwindende Kurvensteigung. Etwa im Fall $a = 1$, $E = 0.001$ (Abb. 3.5) wurden ähnliche Resultate

gefunden; die exakte Lösung verläuft hier bei kleineren U_0 nicht mehr ähnlich einer Geraden; sie hat eher die Form einer sanft abfallenden Stufe. Diese wird wieder von den Resultaten des WOODS-SAXON-Vergleichspotentials speziell für lange Wellen in beeindruckender Weise approximiert; insbesondere wird auch der richtige Grenzwert $R = 0$ für eine verschwindende Barriere erreicht.

Der Fig. 5 in [52] entnimmt man, daß die Konvergenz der Schwellenformel (3.23) von CÔTÉ, FRIEDRICH und TROST [52] im Falle eines Potentials der Form (3.30) großer Werte der Potentialhöhe U_0 bedarf. Leider fand in der Arbeit dieser Autoren kein Vergleich des führenden Terms (3.23) mit der exakten Lösung als Funktion der Energie bzw. Wellenzahl statt; klar ist jedoch nach der Herleitung und dem Kurvenverlauf bei höheren Energien in unserem oberen Bild 3.2, daß sie dort nicht mehr brauchbar ist. Wir wollen sie nun entscheidend verbessern.

3.4 Die Exponential-Regel

Wir untersuchen wieder die Reflexion an Potentialschwänzen der Form (3.14), deren führende Ordnung durch R_{CFT} , Gl. (3.23), gegeben ist. Damit unsere Resultate praktische Relevanz besitzen, muß, wie wir gesehen haben, gewährleistet sein, daß das Gebiet, in dem man den Potentialschwanz als homogen annehmen kann, in jenes hineinreicht, in dem WKB schon verwendet werden darf, was etwa — um nur ein wichtiges Beispiel zu erwähnen — für zwei ⁷Lithium-Atome ($n = 6$) sehr gut erfüllt ist [51]. Die Methode, mit der R_{CFT} hergeleitet wurde, erlaubt es prinzipiell nicht, Beiträge der $O(E)$ oder höher zu bestimmen. Es gibt jedoch Näherungsmethoden, die dies — wenn auch nur für bestimmte Potenzen — zu leisten imstande sind; eine wollen wir auf den praktisch wichtigen Fall des VAN DER WAALS-Potentials ($n = 6$) anwenden. CÔTÉ, HELLER und DALGARNO [51] haben beispielsweise darauf hingewiesen, daß es gerade diese klassisch verbotene Reflexion an einem derartigen Potentialschwanz ist, die die Annäherung kalter Atome trotz einer (zumindest bei großen Abständen) rein attraktiven Wechselwirkung stark unterdrückt.

Schreibt man R_{CFT} als

$$R_{CFT} = 1 - \left(\frac{1}{n-2} \right)^{\frac{2}{n-2}} \frac{4\pi\beta_n}{\Gamma\left(\frac{1}{n-2}\right)\Gamma\left(1 + \frac{1}{n-2}\right)} k_2 = 1 - P_n \cdot \beta_n k_2, \quad (3.31)$$

so erhält man in unserem Sonderfall mittels der säkularen Störungsrechnung (POINCARÉ-LINDSTEDT-Methode) [40], die wir später bei der Überlagerung eines attraktiven singulären Potentials mit einer Zentrifugalbarriere ausführlich besprechen werden, einen komplizierten Ausdruck, der sich für kleine k_2 und $n = 6$ wie

$$R = 1 - P_6 \cdot \beta_6 k_2 + \frac{P_6^2}{2} \cdot \beta_6^2 k_2^2 \quad (3.32)$$

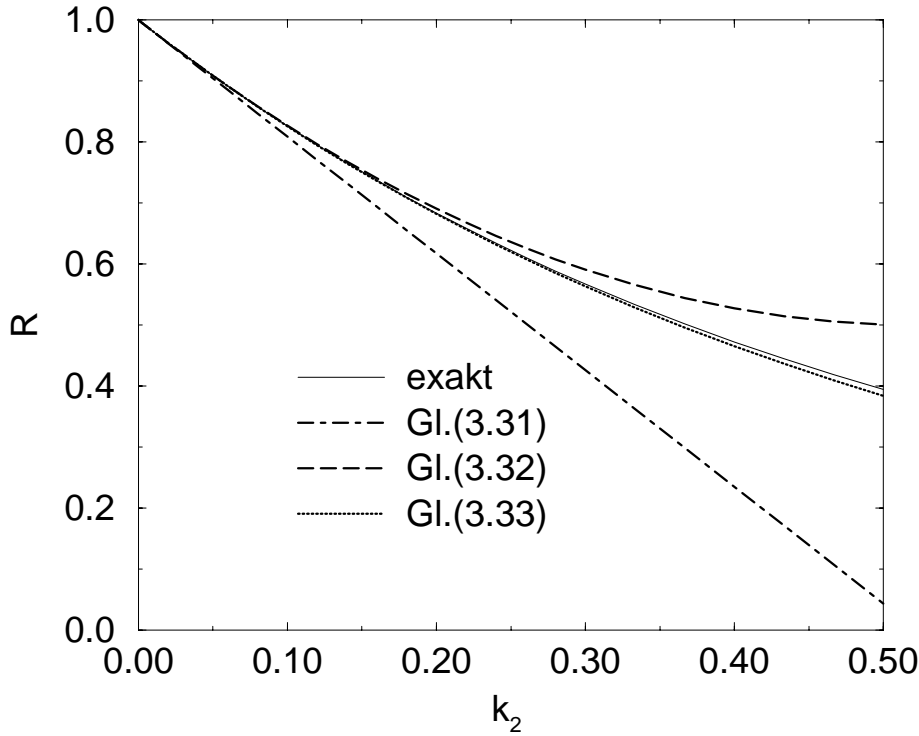


Abbildung 3.6: Reflexionswahrscheinlichkeit ($\beta_6 = 1$) am VAN DER WAALS-Potential $\propto -x^{-6}$ als Funktion der asymptotischen Wellenzahl k_2 . Gezeigt sind die lineare von CÔTÉ, FRIEDRICH und TROST, die quadratische und die exponentielle Näherung.

verhält. Dies kann man als Beginn der Reihenentwicklung der Exponentialfunktion deuten, was folgenden Ansatz nahelegt:

$$R = \exp(-P_6 \cdot \beta_6 k_2). \quad (3.33)$$

Die Resultate dieser Überlegungen sind in Abb. 3.6 gezeigt. Man sieht die Richtigkeit sowohl der linearen (3.23), als auch der quadratischen Näherung (3.32), darüberhinaus stellt das Exponential-Gesetz (3.33) eine hervorragende Näherung in diesem wichtigen Fall dar.

Zusammen mit dem Resultat für das invertierte Exponentialpotential, Gl.(3.5), nährt dies die Vermutung, daß bei anderen Werten von n ein analoges Verhalten

$$R = \exp(-P_n \cdot \beta_n k_2) = \exp \left[-(n-2)^{\frac{n-4}{n-2}} \frac{4\pi\beta_n k_2}{\Gamma^2\left(\frac{1}{n-2}\right)} \right] \quad (3.34)$$

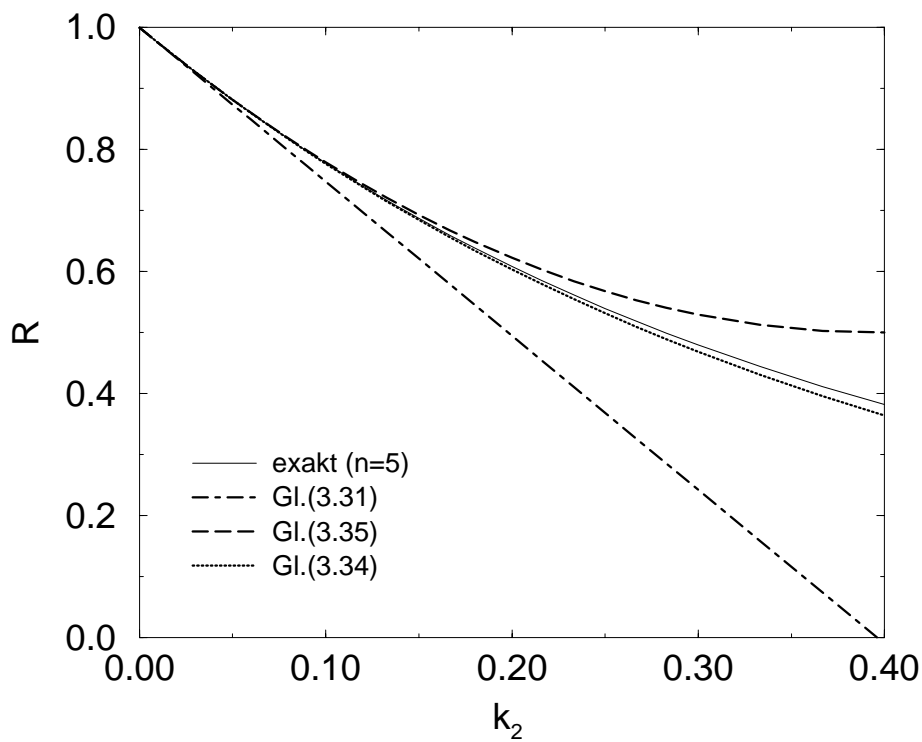
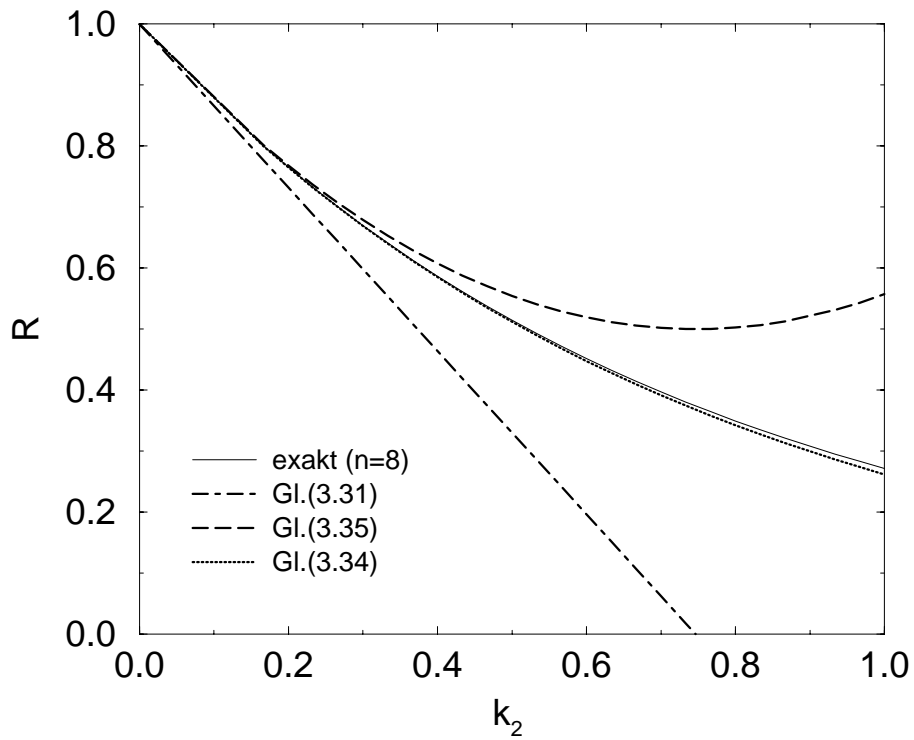


Abbildung 3.7: Reflexionswahrscheinlichkeiten ($\beta_{5,8} = 1$) am Potential $\propto -x^{-8}$ (oben) und $\propto -x^{-5}$ (unten) als Funktion der asymptotischen Wellenzahl k_2 .

vorliegt. Dies wiederum hätte eine Entwicklung

$$R = 1 - P_n \cdot \beta_n k_2 + \frac{P_n^2}{2} \cdot \beta_n^2 k_2^2, \quad (3.35)$$

zur Folge, was wir numerisch untersuchen wollen.

Abb. 3.7 zeigt die Situation für die beiden Fälle $n = 8$ und $n = 5$. Wie man sieht, sind sowohl die lineare, als auch die quadratische Näherung bei kleinen Energien korrekt, während beide von der exponentiellen noch weit übertroffen werden. Letztere verbessert sich offensichtlich mit steigendem n ; wir wenden uns also kleineren Werten von n zu.

Dies ist in Abb. 3.8 veranschaulicht. Während im Fall $n = 4$ (oben) die offensichtlich korrekte quadratische Näherung (3.35) bemerkenswerterweise schon besser ist, als das Exponentialgesetz (3.34), aus dem wir sie erhalten haben, liefern beide Näherungen im Fall $n = 3$ immerhin noch bessere Resultate als die lineare. $n = 3$ ist der einzige der hier untersuchten Fälle, in dem die quadratische Näherung für kleine $\beta_n k_2$ zu klein ist. Ob hier die funktionale Struktur der folgenden Terme richtig wiedergegeben wird, ist noch unklar.

Die P_n nehmen für steigendes n ab; beispielsweise sind $P_3 = 4\pi$, $P_4 = 4$ und $P_6 = 1.91195518994$. Es gilt weiter $P_{n \rightarrow \infty} \rightarrow 0$, d.h. mit größer werdendem n nimmt die Reflexionswahrscheinlichkeit bei festem $\beta_n k_2$ zu, wie man das auch erwarten würde.

Zusammenfassend kann man also sagen, daß die Exponentialregel sogar schon für $n = 3$ eine Verbesserung des linearen Gesetzes darstellt, und mit steigendem n zu einer sehr erfolgreichen Näherung wird, die es uns erlaubt, die Reflexion an derartigen Potentialen auch bei höheren Energien genauso einfach zu berechnen bzw. das Schwellenverhalten weit über die führende Ordnung hinaus zu ermitteln. Abgesehen von einer durchaus erwünschten allgemeinen analytischen Herleitung dieses Resultats wirft es sofort weitere Fragen auf, etwa wie sich die Terme, die die Abweichung vom Exponentialgesetz verursachen, verhalten. Betrachtet man die asymptotische Form der Wellenfunktion für $x \rightarrow \infty$, so liegt die Vermutung nahe, daß es gerade die Abweichungen von einer rein auslaufenden ebenen Welle sein könnten, die hier wichtig werden.

Im nächsten Kapitel werden wir sehen, daß es zumindest in führender Ordnung einen Zusammenhang zwischen der Reflexionswahrscheinlichkeit und den Energieeigenwerten nahe der Schwelle gibt, welcher durch das Verhalten des Potentialschwanzes bedingt ist. Es bleibt zu untersuchen, ob man derartiges auch weiter weg von der Schwelle formulieren kann. In diesem Zusammenhang, aber auch durchaus von eigenständigem Interesse, ist die Frage, ob man die hier gefundene Regel auch auf nicht homogene Potentialschwänze ausweiten kann. Wir werden uns in den nächsten beiden Kapiteln mit derartigen Situationen beschäftigen, insbesondere werden wir die führende Ordnung für eine Superposition aus einem attraktiven singulären Potential und der Drehimpulsbarriere angeben. Was eben

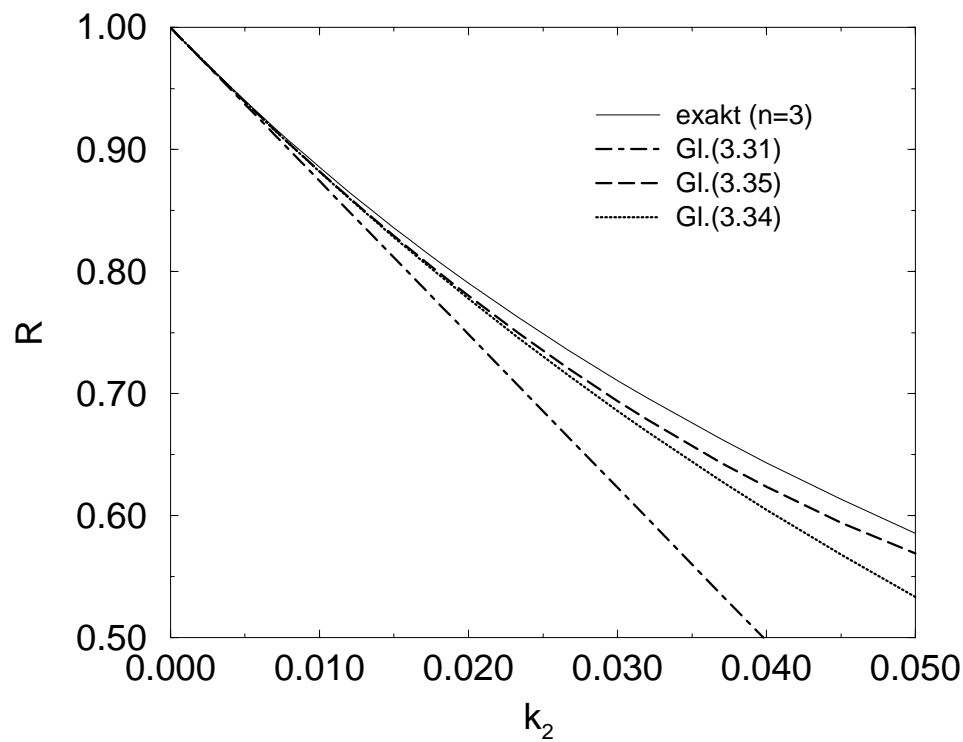
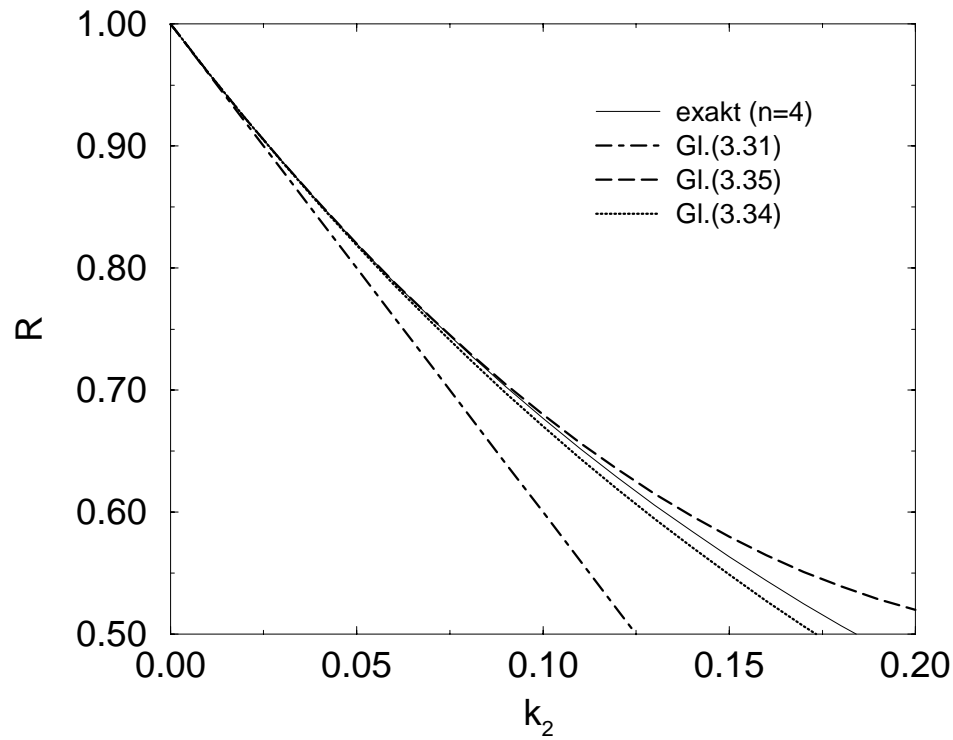


Abbildung 3.8: Reflexionswahrscheinlichkeiten ($\beta_{4,3} = 1$) am Potential $\propto -x^{-4}$ (oben) und $\propto -x^{-3}$ (unten) als Funktion der asymptotischen Wellenzahl k_2 .

besprochen wurde, ist nur ein Sonderfall hiervon. Eine systematische Untersuchung einer eventuellen Verallgemeinerung der Exponentialregel (3.34) auf eine Überlagerung homogener Potentialschwänze steht noch aus.

3.5 Diskussion

Abschließend wollen wir hier noch einmal kurz die wesentlichen Resultate zusammenfassen.

Wir finden eine sehr gute Qualität für die auf der WOODS-SAXON-Stufe basierende Näherung im extrem quantenmechanischen Limes, wo die Änderung von R groß ist und die vorgestellten herkömmlichen semiklassischen Methoden versagen. Unser Augenmerk galt kleinen asymptotischen Wellenzahlen k_2 ; wir sahen speziell bei gut lokalisierten und/oder nicht sehr hohen Stufen, d.h. im Limes langer Wellen, die überragende Güte dieser Näherung. Bei kleinen, aber endlichen Energien versagen hier jene Theorien, die nur den Potentialschwanz berücksichtigen, d.h. die Formel von CÔTÉ, FRIEDRICH und TROST (3.23), unsere Verallgemeinerung (3.34) und die auf dem inversen Exponentialpotential basierende (3.28), weil sie den Effekt der endlichen Stufenhöhe vernachlässigen und für schmaler werdende Rampen gegen den dann falschen Wert $R = 1$ konvergieren. Für hohe Energien, was in der Regel $R \approx 0$ bedeutet, kann man dann die schon besprochenen, oft seit langer Zeit bekannten Näherungsverfahren zum Einsatz bringen.

Die WOODS-SAXON-Stufe ist punktsymmetrisch, dies braucht für das konkrete Potential, auf das man diese als Vergleichsrampe anwendet, jedoch nicht zwingend zu gelten. Die Reflexion über einen Potentialwall kann man ähnlich untersuchen. Unsere Methode kann man insofern noch ausbauen, als man die erhaltene — energieabhängige — WOODS-SAXON-Stufe als Ausgangspunkt einer Störungsrechnung benutzt, in die dann auch die Differenz zwischen dieser und dem tatsächlichen Potential eingeht. Wenn die gezeigten Näherungen gut sind, wofür die hier besprochenen Beispiele ein Gefühl vermitteln sollten und was man mit den Möglichkeiten heutiger Rechentechnik im Einzelfall leicht prüfen kann, verfügt man über vergleichsweise einfach handhabbare und zu interpretierende analytische Ausdrücke, die dann in weitere Untersuchungen eingehen können. Wie bei der Diskussion des Tunnelns an homogenen Schwänzen schon betont, bieten — neben weiteren exakt lösbaren Fällen [73], von denen wir einen im vierten Kapitel noch näher untersuchen werden — Approximationsmethoden, wie etwa die noch genauer zu besprechende säkulare Störungsrechnung die Möglichkeit, sich aus der Sklaverei homogener Potentiale oder niedrigster Energien (wenn auch beides praktisch wichtige Sonderfälle sind) zu befreien. Ein Resultat derartiger Bemühungen war das Exponentialgesetz (3.34), das es uns erlaubt, die Reflexionswahrscheinlichkeit an homogenen Potentialschwänzen auch bei wesentlich höheren Energien zu bestimmen, wo sie deutlich von ihrem Schwellenwert und dem linearen Verhalten abweicht.

Neben der Anwendbarkeit bei niedrigen Energien besteht ein weiterer Vorteil der Methode der Vergleichspotentiale gegenüber etwa denjenigen von BREMMER und MAITRA und HELLER in der Tatsache, daß man hier *nur* das entsprechende klassische Wirkungsintegral zu berechnen braucht und nicht etwa komplizierte Funktionen, bei denen das Wirkungsintegral im Exponenten auftritt, nochmals integrieren muß oder sogar auf die exakte Lösung angewiesen ist. Dies ist von grundsätzlichem Interesse und darüberhinaus der Grund, daß die in den letzten beiden Kapiteln beschriebenen Methoden auch möglichst unabhängig von der konkreten Potentialform anwendbar sind. Eine solche Flexibilität entspricht dem Geist der WKB-Methode und war in der Vergangenheit eine Eigenschaft, die sicher erheblich zu deren Beliebtheit beigetragen hat. In den folgenden zwei Kapiteln werden wir uns jedoch speziellen, zum Teil für die Anwendungen äußerst wichtigen Potentialen zuwenden, dies hat den Vorteil, daß man eventuell bekannte analytische Lösungen ausbeuten kann; in bestimmten Grenzfällen sind die Resultate dann exakt und werden im Zusammenhang mit weiteren Überlegungen auch physikalisch interessant. Die so erhaltenen Ergebnisse sind dann, wie hier demonstriert wurde, natürlich stark an die gemachten Voraussetzungen an das Potential geknüpft. Hier waren wir mit der Energie ausschließlich über der Potentialstufe, was zur klassisch verbotenen Reflexion führte. Das nächste Kapitel betrachtet auch den Fall, daß man knapp unter der Schwelle ist; hier wird das korrespondierende klassische Teilchen reflektiert. Die Auswirkungen des anticlassischen Limes' zeigen sich in der Modifikation der Anschlußregeln, und darauf aufbauend, in der Verallgemeinerung der BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung.

Kapitel 4

Quantisierung und Streuung für tiefe, attraktive Potentialschwänze

...die entsprechenden Quantisierungsvorschriften sind $\oint p_i dq_i = 2\pi\hbar(n_i + \gamma_i)$. Das Integral wird über eine Periode der verallgemeinerten Koordinate q_i erstreckt; γ_i ist eine Zahl der Größenordnung 1, sie hängt von der Art der Randbedingungen für den entsprechenden Freiheitsgrad ab.

L.D. LANDAU und E.M. LIFSCHITZ: Quantenmechanik

Im letzten Kapitel haben wir schon darauf hingewiesen, daß die Bestimmung der Reflexionsamplitude mathematisch äquivalent der Berechnung der Änderung der adiabatischen Invarianten des Harmonischen Oszillators ist. Diese POINCARÉ-schen relativen Integral-Invarianten $\oint pdq$ spielten in der alten Quantentheorie eine bedeutsame Rolle; es war PLANCK, der vorgeschlagen hat, diese zu quantisieren [209] (im letzten Kapitel waren wir auch insofern im anticlassischen Limes, als sich das Analogon dieser Größe stark ändern sollte). Derartige Ideen sind von BOHR, EHRENFEST, EINSTEIN, KELLER [116], SOMMERFELD und anderen weitergeführt worden; sie bildeten die Grundlage der alten Quantentheorie. Zwei Gründe sprachen für diese Art der Quantisierung; erstens ändert sich die Quantenzahl v und damit verbundene Größen, wie etwa die Energie, nicht sprunghaft, wenn langsame äußere Kräfte am Werk sind (entstehende geometrische Phasen müssen in der semiklassischen Quantisierungsregel berücksichtigt werden [206]; auch brauchen im Falle entarteter Niveaus nicht alle Quantenzahlen adiabatische Invarianten zu sein [138]); darüberhinaus weiß man, daß die BOHR-SOMMERFELD¹-Quantisierung für den Harmonischen Oszillator exakt ist, und stellt sich andere Potentiale als aus diesem durch adiabatische Änderung hervorgegangen vor [165].

Wir haben bereits unsere Methode, eine Resonanz semiklassisch zu quantisieren,

¹manchmal auch etwa SOMMERFELD-WILSON-ISHIWARA [82] oder ähnlich benannt.

im ersten Kapitel besprochen, Gl.(1.61). Im Falle $\Theta \rightarrow \infty$ wird die Barriere undurchdringlich, und mit Hilfe von (1.59) erhalten wir als Spezialfall eine phasenkorrigierte BOHR-SOMMERFELD-Quantisierungsregel (siehe etwa [22], [29], [172], [200]):

$$\int_{\tilde{r}}^{\hat{r}} K dr' = v\pi + \frac{\hat{\Phi}}{2} + \frac{\check{\Phi}}{2}, \quad (4.1)$$

wo $\hat{\Phi}; \check{\Phi}$ die Reflexionsphasen (1.18) an den Umkehrpunkten nahe am Ursprung \tilde{r} bzw. außen \hat{r} und $v \in \mathbf{N}_0$ die Quantenzahl sind. Im semiklassischen Limes gilt $\hat{\Phi}; \check{\Phi} = \pi/2$, und es resultiert die übliche halbzahlige Librations-Quantisierung (während die Rotationszustände ganzzahlig quantisiert werden [168]):

$$\int_{\tilde{r}}^{\hat{r}} K dr' = (v + \frac{1}{2})\pi. \quad (4.2)$$

Im ersten Kapitel wurde schon darauf hingewiesen, daß es schwierig ist, hierfür Fehlerschranken anzugeben, eine neuere Arbeit ist etwa [43], jedoch ist es auch wichtig, ein einfaches Kriterium zu haben, wann man Gl.(4.2) benutzen kann. Dies ist sicher gerechtfertigt, wenn die übliche Anschlußregel (1.13) anwendbar ist, wofür schon Voraussetzungen diskutiert wurden, siehe (1.15) und (1.16). Weiter findet man in der Literatur für obige Fragestellung beispielsweise folgende heuristische Regel (vgl. etwa [82]): Der Fehler in der traditionellen BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung ist klein, wenn die beiden Wirkungen $\int_{x_0}^{x_1} \sqrt{2m[E_n - V(x)]} dx'$ und $\int_{x_0}^{x_1} \sqrt{2m[V_0 - E_n]} dx'$ groß gegen \hbar sind. V_0 ist der kleinere der Werte des Potentials an den Rändern des x -Bereichs². Betrachtet man nun ein molekulares Potential, dann ist $V_0 = 0$, und es ist zu erwarten, daß die semiklassische Quantisierung für $E \rightarrow 0$ zumindest einer Modifikation bedarf. Dies wird auch dadurch klar, daß man die übliche Anschlußregel (1.13), aus der man (4.2) ebenfalls herleiten kann, nicht mehr benutzen darf, weil die Linearisierung des Potentials am äußeren Umkehrpunkt \hat{r} nicht mehr zulässig ist. Im vorliegenden Zugang wird die entsprechende Modifikation der Quantisierungsregel durch die Abweichung der Phasen $\hat{\Phi}; \check{\Phi}$ vom semiklassischen Wert $\pi/2$ erreicht, welche dann gerade vom Verhalten des Potentials für $r \rightarrow \infty$ bestimmt wird. Für homogene Potentialschwänze wurden derartige Quantisierungsregeln schon länger betrachtet, siehe etwa [22], [28] oder [201]; wir wollen Aussagen für nicht-homogene Schwänze zu machen.

²Offensichtlich kann das Kriterium erfüllt sein, obwohl WKB nicht gut sein muß, wenn man etwa an den Bereich knapp über dem Gipfel einer Doppelmulde denkt. Daher sollte man die Anwendbarkeit der WKB-Approximation, Gl.(1.11), außer in der unmittelbaren Umgebung der Umkehrpunkte fordern.

Erweiterungen der BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung wurden in die unterschiedlichsten Richtungen unternommen, z.B. wurde vorgeschlagen, $\int_0^\tau L dt$, wo L die LAGRANGE-Funktion des Systems ist, zu quantisieren, um nicht-stationäre Vorgänge zu beschreiben [195]. Sehr oft wird auch auf Situationen mit mehreren Freiheitsgraden oder eine Erhöhung der Ordnung der WKB-Entwicklung [17], [78], [169], [177] eingegangen. Wir interessieren uns hier jedoch einzig für obige phasenkorrigierte BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung, darüberhinaus werden wir wieder wie im dritten Kapitel die Reflexion knapp oberhalb des Potentialschwanzes betrachten. PRESNYAKOV stellte 1991 fest, daß das LEVINSON-Theorem, das besagt, daß die Differenz der Streuphasen bei $E = 0$ und $E \rightarrow \infty$ in Einheiten von π gerade die Anzahl der gebundenen Zustände angibt, die Verallgemeinerung einer phasenkorrigierten BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung ins Kontinuum darstellt [172].

Die umfassende Untersuchung von BOSE-EINSTEIN-Kondensaten haben das gegenwärtige Interesse für den Fall $E \approx 0$ stark belebt [182], [207]; ihm gilt auch unser hauptsächliches Interesse.

Ein typisches molekulares Potential verhält sich bei großen Abständen r der Teilchen wie

$$V(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} - \sum_i \frac{C_{\alpha_i}}{r^{\alpha_i}}, \quad (4.3)$$

und die führende Ordnung von α hängt wesentlich von deren Ladungszustand ab: Grob gesagt, entspricht $\alpha = 1$ dem COULOMB-Gesetz, $\alpha = 2$ der Wechselwirkung einer Ladung mit einem Dipol, $\alpha = 3$ beschreibt das Verhalten zweier Dipole, $\alpha = 4$ die Attraktion einer festen Ladung mit einem induzierten Dipol und schließlich $\alpha = 6$ der VAN DER WAALS-Anziehung. Dem Fall $\alpha = 2$ werden wir uns im nächsten Kapitel näher widmen. Für $\alpha > 2$ wird trotz (eigentlich: gerade wegen) der Singularität des Potentials die WKB-Approximation nahe dem Ursprung $r \rightarrow 0$ immer besser [125], wie man aus (1.11) leicht ableitet. Dieser Potentialverlauf (4.3) ist jedoch nur für hinreichend große r sinnvoll, bei kleinen Abständen werden Mehrteilcheneffekte wichtig, die man dann möglicherweise durch ein repulsives Potential erfassen kann. Falls jedoch der Topf tief genug ist, wird vorher die WKB-Approximation gültig, so daß man sich zunächst auf Phänomene konzentrieren kann, die lediglich vom Schwanz des Potentials herrühren. Nach dem im letzten Kapitel gesagten ist auch klar, daß WKB bei $E = 0$ dort schlecht ist, wo das Potential annähernd konstant ist, also bei großen r . Dieser Bereich kann sich jedoch weit nach innen erstrecken. In solchen Situationen kann auch die numerische Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung zu einer schwierigen Aufgabe werden, was neben grundsätzlichen Präferenzen den Wunsch nach analytischen Zugängen verstärkt.

Für $\alpha > 2$ ist das Wirkungsintegral bei $E = 0$ in den Quantisierungsregeln (4.1), (4.2) endlich, d.h. das Potential hat nur endlich viele gebundene Zustände [74].

Nahe der Schwelle bricht dann jedoch die herkömmliche BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung (4.2) zusammen. Mit Hilfe der exakten Lösungen der entsprechenden SCHRÖDINGER-Gleichung kann man diese jedoch so modifizieren, daß man auch schwellennahe Zustände beschreiben kann. Für positive Energien parametrisiert man die Streuphase durch die sog. Streulänge und effektive Reichweite. Derartige Untersuchungen wurden bisher vornehmlich für *homogene* Potentialschwänze durchgeführt, siehe [22], [70], [88], [94] und [201] und die darin angegebene Literatur; unser Ziel ist es, den Einfluß eines weiteren Summanden zu studieren [65]. Solange der Potentialschwanz im ganzen Bereich, in dem WKB nicht gut anwendbar ist, und noch etwas darüberhinaus hinein in das WKB-Gebiet durch den homogenen Beitrag mit der längsten Reichweite allein gut approximiert werden kann, sind die oben zitierten Theorien erfolgreich. Da aber der Potentialschwanz (4.3) eine Überlagerung darstellt, liegt es nahe, eine solche zu untersuchen: die oben erwähnten Theorien bedürfen einer Modifikation.

Wir beschreiben in diesem Kapitel also das Verhalten der Wellenfunktion nahe der Schwelle $E = 0$ mit besonderem Augenmerk auf nichthomogene Potentialschwänze. Deren Eigenschaften wollen wir benutzen, um die in eine modifizierte BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung bzw. die Reflexionswahrscheinlichkeit eingehenden Größen zu parametrisieren. Anhand eines Beispiels werden die erhaltenen Ergebnisse überprüft und veranschaulicht. Da wir in diesem Kapitel ein an der Atomphysik angelehntes Beispiel untersuchen, werden wir an den betreffenden Stellen die Verwendung atomarer Einheiten auch explizit angeben. Der wesentliche Inhalt dieses Kapitels wurde in [65] veröffentlicht, weiteres Material, speziell zum semiklassischen Limes bei attraktiven, singulären Potentialschwänzen, findet man in [88].

4.1 Fermi-Segrè-Formel bei $E = 0$

Zunächst sei noch einmal darauf hingewiesen, daß die WKB-Wellenfunktionen bei singulären Potentialen $\propto -1/r^\alpha$, $\alpha > 2$, für $r \rightarrow 0$ und alle Energien praktisch fehlerfreie Näherungen an die Wellenfunktionen werden, siehe Gl.(1.11). Typische molekulare Potentiale bilden einen tiefen Topf mit vielen gebundenen Zuständen, bestehend aus einem repulsiven kurzreichweitigen Innenanteil und einem attraktiven Schwanz. Daher liegt die Annahme nahe, daß bei geeigneten Werten der Radialkoordinate r die Anwendung der WKB-Näherung und damit auch die der (verallgemeinerten) BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung zulässig ist. Im antiklassischen Limes ist die Wellenlänge der Wellenfunktion im erlaubten Bereich *und/oder* ihre Eindringtiefe im verbotenen groß gegen die klassischen Längenskalen des Problems. Für einen langreichweitigen Potentialschwanz wie (4.3) hängen diese Grenzfälle vom „reduzierten klassischen Umkehrpunkt“ a ab:

$$a := \kappa \hat{r}, \quad (4.4)$$

wo die Energie $E =: -[\hbar^2 \kappa^2 / (2m_{\text{red}})]$ und damit $1/\kappa$ der asymptotische Wert der Eindringtiefe in das klassisch verbotene Gebiet $r > \hat{r}$ ist. Nach dem vorher gesagten ist klar, daß dem semiklassischen Limes der Grenzwert $a \rightarrow \infty$ entspricht; die klassische Längenskala ist durch \hat{r} gegeben. Umgekehrt finden wir für $a \rightarrow 0$ den antiklassischen Limes, denn die Eindringtiefe $1/\kappa$ wird verglichen mit \hat{r} immer größer. Für $E \rightarrow 0$ divergiert der äußere Umkehrpunkt $\hat{r} \rightarrow \infty$. Hier wird der Potentialschwanz (4.3) durch seinen führenden Term, das ist derjenige mit der kleinsten Potenz $\alpha = \alpha_i$, dominiert:

$$V(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{C_\alpha}{r^\alpha} = -\frac{\hbar^2}{2m_{\text{red}}} \frac{(\beta_\alpha)^{\alpha-2}}{r^\alpha}, \quad \beta_\alpha > 0. \quad (4.5)$$

Hierin ist $\beta_\alpha := (2m_{\text{red}} C_\alpha / \hbar^2)^{1/(\alpha-2)}$ der Potentialstärke-Parameter; er hat für alle $\alpha \neq 2$ die Dimension einer Länge. Nahe der Schwelle $E = 0$ ist $\hat{r} = \kappa^{-2/\alpha} (\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}$ und damit $a = (\kappa \beta_\alpha)^{1-2/\alpha}$. Wir wissen bereits, daß beim COULOMB-Potential $\alpha = 1$ der semiklassische Limes bei $E = 0$ zu erwarten ist und finden $a \rightarrow \infty$ für $0 < \alpha < 2$ und $\kappa \rightarrow 0$. Potentiale mit derartig langsam abfallenden attraktiven Schwänzen besitzen unendlich viele gebundene Zustände, was man an der Tatsache erkennt, daß hier das Wirkungsintegral divergiert und die herkömmliche WKB-Methode zumindest in der Nähe des äußeren Umkehrpunktes nahe der Schwelle immer besser wird.

Für $\alpha > 2$ repräsentiert $\kappa \rightarrow 0$ den antiklassischen Limes $a \rightarrow 0$. Ein derartiges Potential hat höchstens endlich viele gebundene Zustände, und die konventionelle BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung bricht nahe der Schwelle zusammen, siehe z.B. [22], [28], [88], [169] und [201].

Für einen tiefen Potentialtopf mit einem Schwanz, der schneller als $1/r^2$ verschwindet, findet man also für kleine Energien E folgende Quantisierungsregel:

$$v = A - \tilde{A} \sqrt{-E} + o(E^{1/2}) = A - \frac{b\kappa}{\pi} + o(\kappa), \quad (4.6)$$

wo A und $\tilde{A} := b\sqrt{2m_{\text{red}}}/(\pi\hbar)$ Konstanten sind. Die dimensionslose Zahl A legt die Zahl der gebundenen Zustände fest, b hat die Einheit einer Länge und hängt nur vom Potentialverlauf außerhalb des Gebietes ab, in dem WKB verwendet werden darf.

Um die allgemeine Gültigkeit dieser schwelennahen Quantisierung (4.6) zu zeigen, betrachten wir die SCHRÖDINGER-Gleichung bei $E = 0$ und wählen zwei linear unabhängige Lösungen ψ_0 und ψ_1 zu verschwindender Energie mit folgendem asymptotischen Verhalten ($r \rightarrow \infty$):

$$\psi_0(r) \sim 1, \quad \psi_1(r) \sim r. \quad (4.7)$$

Für r -Werte im WKB-Bereich gilt dann

$$\psi_{0,1}(r) = D_{0,1} \frac{1}{\sqrt{p_0(r)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_r^\infty p_0(r') dr' - \frac{\Phi_{0,1}}{2} \right], \quad (4.8)$$

wo D_0 und D_1 Konstanten sind. $p_0(r)$ ist der klassische Impuls bei $E = 0$. Die Phasen $\Phi_{0;1}$ sind dadurch festgelegt, daß die WKB-Wellenfunktionen auf der rechten Seite von Gl.(4.8) mit den exakten Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung $\psi_{0;1}$ übereinstimmen. Genau an der Schwelle $E = 0$ divergiert der äußere Umkehrpunkt $\hat{r} \rightarrow \infty$ und ψ_0 ist die physikalische Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung. Ein Vergleich von (4.8) und (1.60) zeigt, daß Φ_0 der Schwellenwert der Reflexionsphase $\hat{\Phi}$ am äußeren Umkehrpunkt ist.

Nahe der Schwelle, d.h. für kleine, aber nichtverschwindende Energien E , löst die Linearkombination

$$\psi(r) = \psi_0(r) - \kappa\psi_1(r) \quad (4.9)$$

die SCHRÖDINGER-Gleichung für die Ordnungen kleiner als $O(\kappa^2)$ und stimmt darüberhinaus mit der geforderten asymptotischen Form der exakten Wellenfunktion $\psi(r) \propto \exp(-\kappa r)$ überein. In dem Bereich, in dem WKB anwendbar ist, hat die Wellenfunktion die Form

$$\psi(r) \propto \frac{1}{\sqrt{p_0(r)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_r^\infty p_0(r') dr' - \frac{\Phi_0}{2} - \kappa b + O(\kappa^2) \right], \quad (4.10)$$

mit

$$b := \frac{D_1}{D_0} \sin \left[\frac{\Phi_0 - \Phi_1}{2} \right]. \quad (4.11)$$

Wir werden später sehen, daß die Konstante b gerade mit dem Längenparameter aus Gl.(4.6) übereinstimmt. Die WKB-Wellenfunktion ist

$$\psi_{\text{WKB}}(r) \propto \frac{1}{\sqrt{p(r)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_r^{\hat{r}} p(r') dr' - \frac{\hat{\Phi}}{2} \right], \quad (4.12)$$

mit dem lokalen Impuls $p(r)$. Ein Vergleich mit der exakten Lösung (4.10) zeigt, daß die Reflexionsphase $\hat{\Phi}$ am äußeren Umkehrpunkt durch

$$\hat{\Phi} = \Phi_0 + 2[S(E) - S(0)] + 2\kappa b + O(\kappa^2), \quad (4.13)$$

gegeben ist. Dabei ist

$$S(E) := \frac{1}{\hbar} \int_{\tilde{r}}^{\hat{r}} p(r') dr' \quad (4.14)$$

das Wirkungsintegral zur Energie E zwischen den Umkehrpunkten $\tilde{r}; \hat{r}$. In Gl.(4.13) haben wir benutzt, daß der Teil des Wirkungsintegrals vom inneren Umkehrpunkt \tilde{r} zum Punkt r im WKB-Gebiet als eine glatte Funktion der Energie E betrachtet werden kann (hier ist ja der Fall $E = 0$ keineswegs in irgendeiner Form ausgezeichnet), daher wird die Differenz $S(E) - S(0)$ bis auf Terme $O(\kappa^2)$ von den Beiträgen, die von größeren Abständen stammen, festgelegt. Wenn wir annehmen, daß die

innere Reflexionsphase $\check{\Phi}$ eine glatte (analytische) Funktion der Energie bei $E = 0$ ist, $\check{\Phi}(E) = \check{\Phi}(0) + O(E)$, dann wird die Quantisierungsregel (4.1) zu

$$S(E) = v\pi + \frac{\check{\Phi}(0)}{2} + \frac{\Phi_0}{2} + S(E) - S(0) + \kappa b + O(\kappa^2). \quad (4.15)$$

Jetzt ist noch zu beachten, daß das Wirkungsintegral zur Energie E , das auf der rechten Seite von Gl.(4.15) als Beitrag zu $\check{\Phi}/2$ auftritt, sich gerade mit der linken Seite von (4.15) aufhebt; daher geht die Energieabhängigkeit des Wirkungsintegrals nahe der Schwelle in die Quantisierungsregel (4.15) nicht ein. Diese hat die angekündigte Form (4.6) mit

$$A := \frac{1}{\pi} \left[S(0) - \frac{\check{\Phi}(0)}{2} - \frac{\Phi_0}{2} \right]. \quad (4.16)$$

A hängt also von den Schwellenwerten der Reflexionsphasen und dem Wirkungsintegral zur Energie $E = 0$, $S(0)$, ab. Dieses ist durch den Potentialverlauf im gesamten klassisch erlaubten Gebiet bestimmt. Für typische Potentiale mit einem glatten repulsiven Innenanteil sind am inneren Umkehrpunkt \check{r} normalerweise die Bedingungen des semiklassischen Limes' erfüllt, so daß in guter Näherung gilt: $\check{\Phi}(0) = \pi/2$. Der Längenparameter b und die vom äußeren Umkehrpunkt herrührende Phase Φ_0 (zu $E = 0$) hängen nur von den Eigenschaften der exakten ($E=0$)-Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung des Potentialschwanzes außerhalb des WKB-Bereiches ab. Aus der Quantisierungsregel (4.6) folgt, daß die Niveaudichte im betrachteten Fall an der Schwelle eine Singularität $1/\sqrt{|E|}$ [28] hat,

$$\rho(E) := \frac{dv}{dE} \stackrel{\kappa \rightarrow 0}{\sim} \frac{m_{\text{red}}}{\hbar^2} \frac{b}{\pi \kappa} + \text{const.} \quad (4.17)$$

Diese Proportionalität zu $1/\kappa \propto 1/\sqrt{|E|}$ gilt für alle regulären Potentiale, deren Schwanz asymptotisch schneller als $1/r^2$ verschwindet. Die Stärke dieser Singularität ist gerade durch b gegeben.

Für ein Potential mit homogenen Schwanz $\propto r^d, d \geq -2$, findet man durch Ableiten der Quantisierungsregel (4.1) bzw. (4.2) nach E die Zustandsdichte $dv/dE \propto |E|^{1/d-1/2}$. Beim Harmonischen Oszillator ist $d = 2$, für das lineare Potential $d = 1$ [71] (solche Potentiale sind wichtig für die hohen Zustände von Quark-Antiquark-Systemen, daher wurde erst jüngst wieder ein derartiges semiklassisch untersucht [32]. Es wäre interessant zu wissen, ob man durch die Anwendung der modifizierten Anschlußformeln die dort erzielten Ergebnisse verbessern kann), $d \rightarrow 0$ im Grenzfall des freien Teilchens bzw. beim logarithmischen Potential [97] (dies entspricht einem geladenen unendlich langen Draht) oder $d = -1$ für das COULOMB-Problem. Für $d = -2$ stimmt zwar die Proportionalität, aber der Vorfaktor zeigt, daß der klassische Limes hier erst bei großen Potentialstärken erreicht wird, analog zur Streuung an einem entsprechenden repulsiven Potential [115]. Alternativ zu dieser Betrachtung kann man eine sogenannte LANGER-Modifikation durchführen. Dieser Grenzfall wird im fünften Kapitel besprochen und z.T. gegenwärtig noch

vom Autor untersucht. Potentiale mit einem attraktiven exponentiellen Schwanz kann man versuchen, als $d \rightarrow -\infty$ zu interpretieren; in Übereinstimmung mit der oberen Zustandsdichte (4.17) bekommt man eine Proportionalität zu $|E|^{-1/2}$, was näherungsweise etwa mit den bekannten Energieeigenwerten [71] des HULTHÉN- bzw. sogar exakt mit z.B. denen des \cosh^{-2} – oder des MORSE-Potentials übereinstimmt. Es bleibt aber nachdrücklich zu betonen, daß in dem uns hier interessierenden Fall $d < -2$ für die Zustandsdichte an der Schwelle $dv/dE \propto |E|^{-1/2}$ unabhängig von d gilt, was die herkömmliche Quantisierungsregel (4.2) nicht erklären kann. Nach unserem Dafürhalten stellt dies keinen Widerspruch zum Korrespondenzprinzip dar, weil diese Situation dem antiklassischen Limes entspricht, was schon im ersten Kapitel besprochen wurde. Siehe hierzu auch das nächste Kapitel, [28], [88], [121] und [149].

Die Verknüpfung von Zustandsdichte und normierter radialer Wellenfunktion bei kleinen Argumenten wird seit langer Zeit — auch unter Einsatz semiklassischer Methoden — untersucht; nach einem frühen Beispiel, das die Hyperfeinstruktur zum Inhalt hatte, nennt man einen derartigen Zusammenhang FERMI-SEGRÈ-Formel, siehe etwa [60] und die darin zitierte Literatur. Weil wir die Gültigkeit der WKB-Methode bis in den Schwanz des Potentials hinein voraussetzen, brauchen wir dem Verlauf der Wellenfunktion nicht bis $r = 0$ zu folgen; die Berechnung der Normierungskonstanten bleibt uns ebenfalls erspart. In der von uns betrachteten Situation nahe der Schwelle ist also Gl.(4.17) die entsprechende FERMI-SEGRÈ-Formel.

Für einen attraktiven Kasten

$$\frac{2m_{\text{red}}}{\hbar^2} V(r) = \begin{cases} -K_0^2, & 0 < r \leq L, \\ 0, & r > L, \end{cases} \quad (4.18)$$

ist der oben definierte WKB-Bereich durch das Intervall $0 < r < L$ gegeben; die Wellenfunktionen zu verschwindender Energie (4.7) sind hier

$$\psi_0(r) = \cos [K_0(L - r)], \quad \psi_1(r) = \frac{L}{\cos(\Phi_1/2)} \cos \left[K_0(L - r) - \frac{\Phi_1}{2} \right]. \quad (4.19)$$

Die Reflexionsphase für $E = 0$ verschwindet, $\Phi_0 = 0$; für die in ψ_1 auftretende Phase Φ_1 ist $\tan(\Phi_1/2) = -1/(LK_0)$. Mit Gl.(4.11) wird damit in diesem Fall

$$b = \frac{1}{K_0}. \quad (4.20)$$

Der innere Umkehrpunkt korrespondiert mit einer hohen Wand (siehe Kap. 1), also ist $\check{\Phi} = \pi$; mit $\Phi_0 = 0$ folgt aus Gl.(4.16) damit

$$A = \frac{1}{\pi} \left(LK_0 - \frac{\pi}{2} \right). \quad (4.21)$$

Für einen homogenen Potentialschwanz (4.5) sind die Wellenfunktionen zu verschwindender Energie $E = 0$ durch $r^{1/2} \mathcal{C}[2\beta_\alpha^{(\alpha-2)/2} r^{(2-\alpha)/2} / (\alpha - 2)]$ gegeben, wo

die \mathcal{C} BESSEL-Funktionen zur Ordnung $\pm 1/(\alpha - 2)$ sind; siehe beispielsweise [1] oder [73]. Man findet

$$\Phi_0 = \frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{\alpha - 2}, \quad \Phi_1 = \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{\alpha - 2} \quad (4.22)$$

für die Phasen und [52]

$$D_{0,1} = \sqrt{\frac{\hbar(\alpha - 2)}{\pi}} \cdot \Gamma\left(1 \pm \frac{1}{(\alpha - 2)}\right) \left[\frac{(\alpha - 2)^{1/(\alpha-2)}}{\sqrt{\beta_\alpha}}\right]^{\pm 1}. \quad (4.23)$$

Wegen Gl.(4.11) wird der Längenparameter b [28], [201],

$$b = b_\alpha = \beta_\alpha \frac{\sin[\pi/(\alpha - 2)] \Gamma(1 - \frac{1}{\alpha-2})}{(\alpha - 2)^{2/(\alpha-2)} \Gamma(1 + \frac{1}{\alpha-2})}; \quad (4.24)$$

er nimmt monoton mit α ab und es ist $b_\alpha \sim \pi\beta_\alpha/(\alpha - 2)$, wenn α groß wird. Für $\alpha = 2 + 1/n$, mit $n = 1, 2, 3, \dots$ kompensieren sich die Nullstellen von $\Gamma(1 - 1/(\alpha - 2))$ mit denen des Sinus' und es gilt $b_\alpha = \pi\beta_\alpha n^{2n+1}/(n!)^2$. Im Falle $\alpha \rightarrow 2$ gilt $b_\alpha \sim (\beta_\alpha/2) \exp[2/(\alpha - 2)]$. Der Beitrag $2[S(E) - S(0)]$ zur Phase $\hat{\Phi}$ [siehe (4.13)] ist proportional zu $a = (\kappa\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}$ für den homogenen Potentialschwanz (4.5), daher ist dies die dominierende Energieabhängigkeit von $\hat{\Phi}$ bei $E = 0$. Aufgrund der Auslöschung von $S(E)$ in Gl.(4.15) trägt dies aber nicht zum Niederenergieverhalten der Quantisierungsregel (4.6) bei. Wenn $\check{\Phi}(0) = \pi/2$ in guter Näherung gilt, dann wird für einen homogenen Potentialschwanz $\propto -1/r^\alpha$:

$$A = \frac{1}{\pi} S(0) - \frac{1}{2} - \frac{1}{2(\alpha - 2)}. \quad (4.25)$$

4.2 Reflexion am Potentialschwanz

Wie wir schon aus dem vorangegangenen Kapitel wissen, werden die Wellen bei positiven Energien $E = \hbar^2 k^2 / (2m_{\text{red}}) > 0$ zumindest teilweise reflektiert. In der Schreibweise dieses Kapitels gilt dann bis zur Ordnung k^2

$$\psi(r) = \psi_0(r) + ik\psi_1(r), \quad k > 0, \quad (4.26)$$

was einer auslaufenden Welle $\psi \sim \exp(ikr)$ entspricht. Anpassen der WKB Wellenfunktion (4.26) liefert dann die für homogene Schwänze schon aus Gl.(3.23) bekannte Größe

$$|r| = 1 - 2bk + o(k), \quad (4.27)$$

wo b gerade der von uns in Gln.(4.10), (4.11) eingeführte Längenparameter ist. Dies ist mit folgender einfacher Beobachtung konsistent: die Wellenfunktion zu $E > 0$, (4.26), unterscheidet sich von der unterhalb der Schwelle $E < 0$, (4.9)

durch die Ersetzung $ik \leftrightarrow -\kappa$ (siehe hierzu auch [67]). Mit der im vorigen Kapitel, Gl.(3.34), eingeführten Größe P_n besteht also der Zusammenhang $b = P_n/4$. Wenn wir im Ausdruck (4.13) in der Reflexionsphase am äußeren Umkehrpunkt ebenfalls $\kappa \rightarrow -ik$ ersetzen, dann hat dies einen Imaginärteil von $-2bk$ zur Folge, wodurch die Reflexionsamplitude $r_{WKB} = \exp(-i\Phi_1)$, (1.59), einen Betrag kleiner 1 hat, der gerade durch obige Gleichung gegeben ist.

Der Längenparameter b legt also sowohl den singulären Beitrag zur Niveaudichte (4.17), als auch das Reflexionsverhalten des Schwanzes nahe der Schwelle fest.

4.3 Streulängen

Die am Ursprung $r = 0$ reguläre Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung erhält bei der elastischen Streuung an einem Potential eine asymptotische Phasenverschiebung $\delta(k)$ (siehe z.B. [125], [184]),

$$\psi_{\text{reg}}(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\propto} \sin(kr + \delta). \quad (4.28)$$

Für Potentiale, die asymptotisch schneller als $O(r^{-3})$ verschwinden, kann man nahe der Schwelle $E = 0$ schreiben:

$$\delta(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} n\pi - ka_0. \quad (4.29)$$

Die Konstante a_0 ist die sogenannte Streulänge. Falls sich das Potential asymptotisch wie $V(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} -[\hbar^2/(2m_{\text{red}})]\beta_3/r^3$ verhält, bricht obige Näherung zusammen, und es gilt $\delta(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -\beta_3 k \ln k$ [87], [191]; alle diese Aussagen gelten für s -Wellen-Streuung, also Drehimpuls Null; nichtverschwindende Drehimpulse werden erst im nächsten Kapitel betrachtet.

Der Fall eines Potentialschwanzes $\propto r^{-3}$ wird in der Natur beispielsweise durch den „resonanten“ Austausch eines Photons zwischen zwei neutralen, identischen verschieden angeregten Atomen realisiert; er ist von einiger Bedeutung [183], [189]. Für Potentiale, die schneller als $1/r^3$ abfallen, gilt (4.29) und das asymptotische Verhalten der regulären Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung ist nahe der Schwelle $k \rightarrow 0$

$$\psi_{\text{reg}}(r) \propto k(r - a_0). \quad (4.30)$$

In Ordnung $k \propto \sqrt{E}$ kann man die Wellenfunktion ψ_{reg} für positive Energien $E > 0$ als Linearkombination der beiden linear unabhängigen Lösungen zu $E = 0$, ψ_0 und ψ_1 , deren Verhalten für große und kleine r durch (4.7) und (4.8) bekannt ist, schreiben:

$$\psi_{\text{reg}}(r) \propto k[\psi_1(r) - a_0\psi_0(r)]. \quad (4.31)$$

Daher gilt im WKB-Bereich:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{reg}}(r) \propto & \frac{1}{\sqrt{p_0(r)}} D_1 \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_r^\infty p_0(r') dr' - \frac{\Phi_1}{2} \right) \\ & - \frac{1}{\sqrt{p_0(r)}} a_0 D_0 \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_r^\infty p_0(r') dr' - \frac{\Phi_0}{2} \right). \end{aligned} \quad (4.32)$$

Die Abkürzungen

$$\Phi_+ := \Phi_0 + \Phi_1, \quad \Phi_- := \Phi_0 - \Phi_1, \quad (4.33)$$

vereinfachen Gl.(4.32) zu

$$\psi_{\text{reg}}(r) \propto \frac{1}{\sqrt{p_0(r)}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_r^\infty p_0(r') dr' - \frac{\Phi_+}{4} - \eta \right), \quad (4.34)$$

wobei η definiert ist durch:

$$\tan \eta := \frac{a_0 D_0 + D_1}{a_0 D_0 - D_1} \tan \left(\frac{\Phi_-}{4} \right). \quad (4.35)$$

Andererseits nehmen wir an, daß im WKB-Bereich die Funktion ψ_{reg} gut durch

$$\psi_{\text{WKB}}(r) \propto \frac{1}{\sqrt{p(r)}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_{\check{r}(E)}^r p(r') dr' - \frac{\check{\Phi}}{2} \right) \quad (4.36)$$

approximiert wird. Da der innere Umkehrpunkt $\check{r}(E)$ und der klassische Impuls $p(r)$ nahe der Schwelle glatte Funktionen von E sind, können wir in $O(k)$ ersetzen:

$$\int_{\check{r}(E)}^r p(r') dr' \rightarrow \int_{\check{r}(0)}^r p_0(r') dr'. \quad (4.37)$$

Wir fordern, daß die Funktionen (4.34) und (4.36) übereinstimmen sollen, daß also gilt:

$$\eta = n\pi + S(0) - \frac{\check{\Phi}}{2} - \frac{\Phi_+}{4} = n\pi + \pi A + \frac{\Phi_-}{4}, \quad (4.38)$$

wo $S(0) = \left(\frac{1}{\hbar}\right) \int_{\check{r}(0)}^\infty p_0(r) dr$ der Wert des Wirkungsintegrals (4.14) bei $E = 0$ ist; A ist die Konstante aus der Quantisierungsregel (4.6), die die Anzahl gebundener Zustände festlegt (4.16),

$$\pi A = S(0) - \frac{\check{\Phi}(0)}{2} - \frac{\Phi_0}{2}; \quad (4.39)$$

$\check{\Phi}(0)$ und Φ_0 sind die Schwellenwerte der Reflexionsphasen am inneren bzw. äußeren Umkehrpunkt. Wegen (4.38) gilt $\tan \eta = \tan(\pi A + \Phi_-/4)$, und aus Gl.(4.35) erhalten wir damit

$$a_0 = \frac{D_1}{D_0} \left[\frac{\tan \eta + \tan(\Phi_-/4)}{\tan \eta - \tan(\Phi_-/4)} \right] = \frac{D_1}{D_0} \cos\left(\frac{\Phi_-}{2}\right) \left[1 + \frac{\tan(\Phi_-/2)}{\tan(\pi A)} \right], \quad (4.40)$$

oder

$$a_0 = \frac{b}{\tan(\Phi_-/2)} + \frac{b}{\tan(\pi A)}, \quad (4.41)$$

wo b der Längenparameter aus Gl.(4.11) ist. Der erste Term auf der rechten Seite von Gl.(4.41)

$$\bar{a}_0 := \frac{D_1}{D_0} \cos\left(\frac{\Phi_-}{2}\right) = \frac{b}{\tan(\Phi_-/2)}, \quad (4.42)$$

die sogenannte „mittlere Streulänge“ hängt nur von den Schwanz-Parametern b und Φ_- ab. Der zweite Term in Gl.(4.41) hängt oszillatorisch und singular vom Wirkungsintegral $S(0)$ ab; für eine Menge großer und ausgeglichen verteilter Werte von $S(0)$, d.h. von πA , wird der zweite Term in ausgewogener Weise positive und negative Werte annehmen, was die Interpretation des ersten Summanden als mittlere Streulänge nahelegt.

Wenn es bei der Energie $-\hbar^2 \kappa_0^2/(2\mu)$ sehr nahe an der Schwelle einen gebundenen Zustand gibt, gilt die Quantisierungsregel (4.6) und daher ist $\tan(\pi A) \sim \kappa_0 b + O(\kappa_0^2)$; für die Abhängigkeit der Streulänge (4.41) von κ_0 findet man dann das schon aus allgemeineren Überlegungen bekannte Verhalten (siehe z.B. [184]):

$$a_0 \stackrel{\kappa_0 \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{\kappa_0} + \text{const.} \quad (4.43)$$

Für den attraktiven Kasten (4.18) haben wir

$$b = \frac{1}{K_0}, \quad \tan \frac{\Phi_-}{2} = -\tan \frac{\Phi_1}{2} = \frac{1}{LK_0} \quad (4.44)$$

und wegen (4.21) wird

$$\pi A = LK_0 - \frac{\pi}{2} \implies \tan(\pi A) = -\frac{1}{\tan(LK_0)}. \quad (4.45)$$

Das führt zu dem wohlbekanntem Verhalten der Streulänge

$$a_0 = L - \frac{\tan(LK_0)}{K_0}, \quad (4.46)$$

und die mittlere Streulänge ist einfach $\bar{a}_0 = L$.

Für einen homogenen Potentialschwanz (4.5) ist die Konstante A durch (4.25) gegeben, wenn wir am inneren Umkehrpunkt den semiklassischen Fall $\Phi(0) = \pi/2$ annehmen. Damit wird $1/\tan(\pi A) = -\tan\{S(0) - \pi/[2(\alpha - 2)]\}$. Die Amplituden $D_{0,1}$ sind durch Gl.(4.23) gegeben und weiter ist

$$\frac{\Phi_-}{2} = \frac{\pi}{\alpha - 2}. \quad (4.47)$$

Mit diesen Werten sind die Gln. (4.40), (4.42) exakt äquivalent zu den Resultaten, die für homogene Potentialschwänze $\propto -1/r^\alpha$ schon bekannt waren [70], [94]. Hier gilt für die mittlere Streulänge (4.42) einfach $b_\alpha/\tan[\pi/(\alpha - 2)]$; sie ist positiv, wenn $\alpha > 4$ und negativ für $\alpha < 4$. Bei $\alpha = 4$ verschwindet sie.

4.4 Superposition zweier Potentialschwänze

Wir haben in den beiden vorangegangenen Kapiteln schon gesehen, daß es nicht immer ausreicht, nur die für $r \rightarrow \infty$ homogenen Potentialschwänze zu betrachten, weil es sein kann, daß die WKB-Methode in einem Bereich versagt, in dem eine Beimischung anderer Terme wichtig wird. Wir wollen nun die mit einer derartigen Inhomogenität des Potentials verbundenen Effekte studieren, und betrachten daher Potentiale, die eine Superposition zweier homogener Anteile sind

$$V(r) \sim -\frac{C_\alpha}{r^\alpha} - \frac{C_{\alpha_1}}{r^{\alpha_1}} = -\frac{\hbar^2}{2m_{\text{red}}} \left(\frac{(\beta_\alpha)^{\alpha-2}}{r^\alpha} + \frac{(\beta_{\alpha_1})^{\alpha_1-2}}{r^{\alpha_1}} \right), \quad (4.48)$$

mit $\alpha_1 > \alpha > 2$ und $\beta_\alpha, \beta_{\alpha_1} \geq 0$. Die entsprechende SCHRÖDINGER-Gleichung dieses Problems kann, falls etwa zusätzlich

$$\alpha = m + 1, \quad \alpha_1 = 2m; \quad m > 1 \quad (4.49)$$

gilt, bei $E = 0$ durch konfluente hypergeometrische Funktionen exakt gelöst werden [73]. Mit den Abkürzungen

$$\nu := \frac{1}{m-1} = \frac{1}{\alpha-2} = \frac{2}{\alpha_1-2} \quad (4.50)$$

und

$$\xi := \left(\frac{\beta_{\alpha_1}}{r} \right)^{1/\nu}, \quad (4.51)$$

bekommen wir die Lösungen zu verschwindender Energie $E = 0$ (4.7):

$$\psi_0(r) = \exp(i\nu\xi) {}_1F_1\left(\frac{1+\nu-i\gamma\nu}{2}, 1+\nu, -2i\nu\xi\right), \quad (4.52)$$

$$\psi_1(r) = r \exp(i\nu\xi) {}_1F_1\left(\frac{1-\nu-i\gamma\nu}{2}, 1-\nu, -2i\nu\xi\right). \quad (4.53)$$

Die gemäß Gl.(4.8) in ψ_0 und ψ_1 auftretenden Phasen Φ_0 und Φ_1 sind

$$\Phi_0 = (1 + \nu) \frac{\pi}{2} + \gamma \nu \left[1 - \ln \left(\frac{\gamma \nu}{2} \right) \right] - 2 \arg \Gamma \left(\frac{1 + \nu - i \gamma \nu}{2} \right), \quad (4.54)$$

$$\Phi_1 = (1 - \nu) \frac{\pi}{2} + \gamma \nu \left[1 - \ln \left(\frac{\gamma \nu}{2} \right) \right] - 2 \arg \Gamma \left(\frac{1 - \nu - i \gamma \nu}{2} \right); \quad (4.55)$$

wo

$$\gamma := \left(\frac{\beta_\alpha}{\beta_{\alpha_1}} \right)^{m-1} = \left(\frac{\beta_\alpha}{\beta_{\alpha_1}} \right)^{1/\nu} \quad (4.56)$$

ein Maß für die relative Gewichtung der beiden Summanden im Potential ist. Die Amplituden von ψ_0 werden bestimmt von D_0 und D_1 , für deren Verhältnis

$$\frac{D_1}{D_0} = \beta_{\alpha_1} (2\nu)^\nu \frac{\Gamma(1 - \nu)}{\Gamma(1 + \nu)} \left| \frac{\Gamma\left(\frac{1+\nu-i\gamma\nu}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1-\nu-i\gamma\nu}{2}\right)} \right| \quad (4.57)$$

gilt. Den Längenparameter (4.11) ermitteln wir aus (4.54), (4.55) und (4.57) zu

$$b = \beta_{\alpha_1} (2\nu)^\nu \frac{\Gamma(1 - \nu)}{\Gamma(1 + \nu)} \left| \frac{\Gamma\left(\frac{1+\nu-i\gamma\nu}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1-\nu-i\gamma\nu}{2}\right)} \right| \sin \left\{ \frac{\pi\nu}{2} - \arg \left[\frac{\Gamma\left(\frac{1+\nu-i\gamma\nu}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1-\nu-i\gamma\nu}{2}\right)} \right] \right\}. \quad (4.58)$$

Um b im Grenzfall eines homogenen Potentials $\gamma \rightarrow 0$, d.h. $\beta_\alpha/\beta_{\alpha_1} \rightarrow 0$ zu ermitteln, benutzen wir

$$\arg \Gamma(x - iy) \stackrel{y \rightarrow 0}{\sim} -y\psi(x) + O(y^3), \quad (4.59)$$

wo $\psi(x) = \Gamma'(x)/\Gamma(x)$ die Digamma-Funktion ist, die Identität

$$\frac{\Gamma(z/2)}{\Gamma(z)} = \frac{\sqrt{\pi}}{2^{z-1}} \frac{1}{\Gamma[(z+1)/2]} \quad (4.60)$$

und $|\Gamma(x-iy)| = |\Gamma(x)| (1 + O(y^2))$ [1]. Daher wird aus Gl.(4.58) für $\nu \neq 1, 2, 3, \dots$

$$b \stackrel{\gamma \rightarrow 0}{\sim} \beta_{\alpha_1} \left(\frac{\nu}{2} \right)^\nu \frac{\Gamma\left(1 - \frac{\nu}{2}\right)}{\Gamma\left(1 + \frac{\nu}{2}\right)} \sin \left(\frac{\pi\nu}{2} + c_\nu \gamma \right) \left[1 + O(\gamma^2) \right], \quad (4.61)$$

mit

$$c_\nu = \frac{\nu}{2} \left[\psi \left(\frac{1 + \nu}{2} \right) - \psi \left(\frac{1 - \nu}{2} \right) \right]. \quad (4.62)$$

Für $\nu < 1$, also $m > 2$, ist die Konstante c_ν positiv. Wie erwartet, stimmt für $\gamma = 0$ Gl.(4.61) mit dem Resultat eines homogenen Potentials $-1/r^{\alpha_1}$, Gl.(4.24),

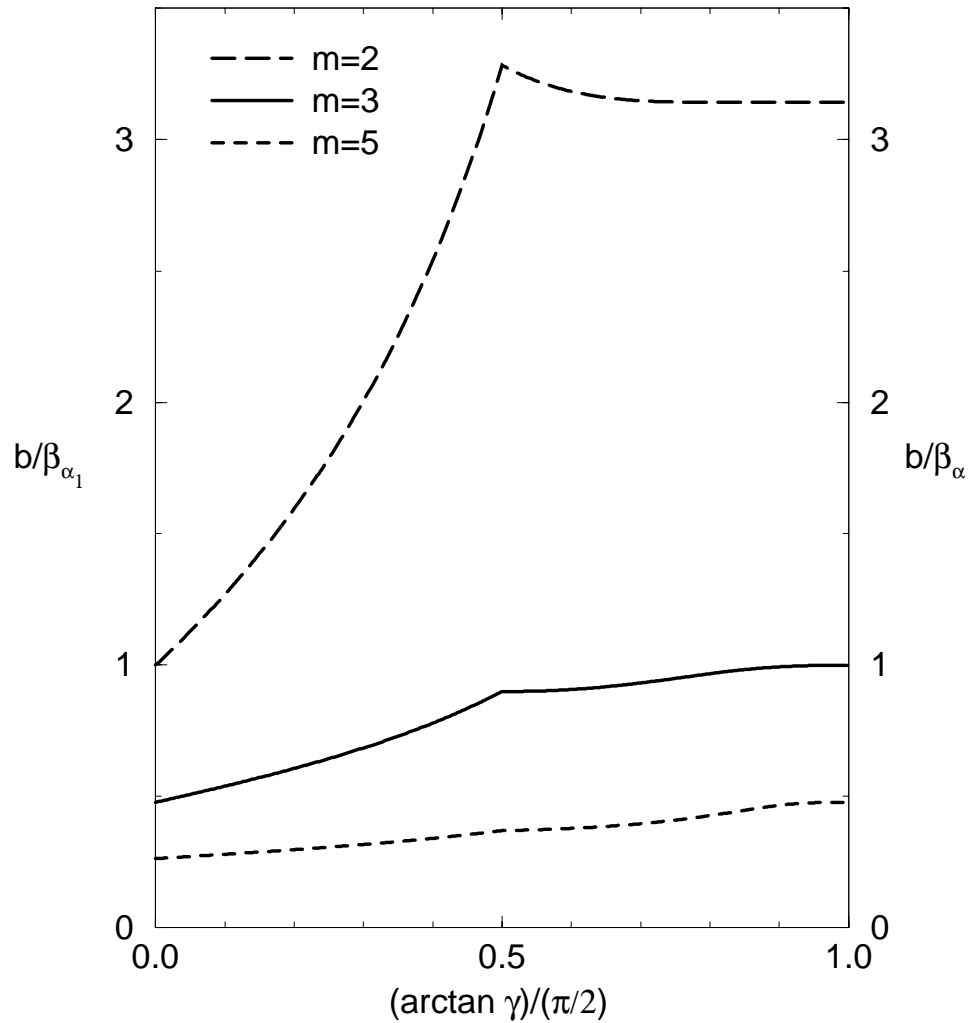


Abbildung 4.1: Abhängigkeit des Längenparameters b (4.58) für $m = 2, 3$ und 5 , d.h. $(\alpha, \alpha_1) = (3, 4), (4, 6)$ und $(6, 10)$ vom Winkel γ (4.56), der die Mischung der Potentiale beschreibt. Im Fall $\gamma \leq 1$, d.h. $\beta_{\alpha} \leq \beta_{\alpha_1}$ ist b/β_{α_1} gezeigt, für $\gamma \geq 1$ sieht man b/β_{α} .

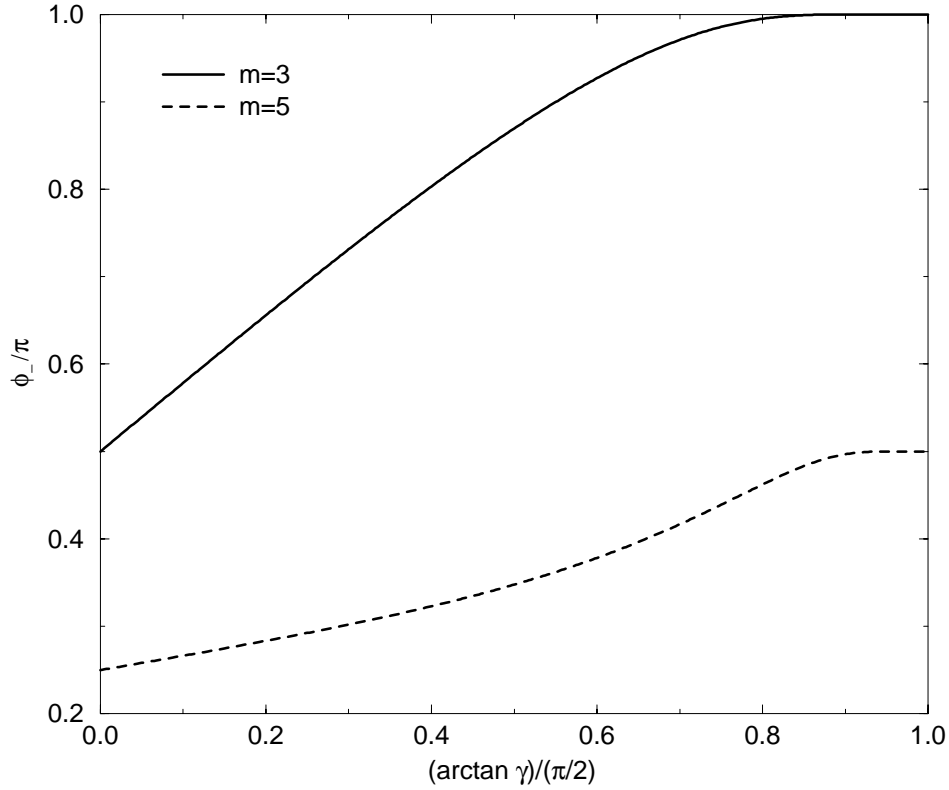


Abbildung 4.2: Abhängigkeit der Phasendifferenz Φ_- (4.67) von γ . Φ_- verknüpft nach Gl.(4.42) die mittlere Streulänge mit dem Längenparameter b . Für die Bedeutung von m siehe Gl.(4.49).

überein. Für $\gamma \rightarrow \infty$ d.h. $\beta_{\alpha_1}/\beta_\alpha \rightarrow 0$ ist die Entwicklung des Arguments der Gamma-Funktion [1]:

$$\arg \Gamma(x - iy) \stackrel{y \rightarrow \infty}{\sim} y - y \ln y - \frac{\pi}{2} \left(x - \frac{1}{2} \right) + \frac{6x^2 - 6x + 1}{12y} + O\left(\frac{1}{y^3}\right). \quad (4.63)$$

Damit, und aus der asymptotischen Entwicklung [1]

$$\left| \frac{\Gamma(a - iy)}{\Gamma(b - iy)} \right| \stackrel{y \rightarrow \infty}{\sim} y^{a-b} \left[1 - \left(\frac{(a-b)[(a-b)^2 - 1]}{24y^2} \right) \right] \quad \text{für } a + b - 1 = 0, \quad (4.64)$$

erhalten wir

$$b \stackrel{\gamma \rightarrow \infty}{\sim} \beta_\alpha \nu^{2\nu} \frac{\Gamma(1 - \nu)}{\Gamma(1 + \nu)} \sin(\pi\nu) \left[1 - \frac{1}{6\gamma^2} \left(\frac{1}{\nu} - \nu \right) \right] + O\left(\frac{1}{\gamma^3}\right). \quad (4.65)$$

Im Limes $1/\gamma = 0$ wird dies wieder zu Gl.(4.24), dem Ergebnis (4.24) eines homogenen Potentialschwanzes $\propto -1/r^\alpha$. Die Formel (4.58) gilt für alle $\nu > 0$, außer $\nu = n = 1, 2, 3, \dots$, wo Singularitäten in den Gamma-Funktionen auftreten. Die Werte $\nu = n$ entsprechen dem Fall $\alpha = 2 + 1/n$ und $\alpha_1 = 2 + 2/n$. Für $\nu = 1$, d.h. $\alpha = 3$, $\alpha_1 = 4$ und $\gamma = \beta_3/\beta_4$, gilt statt Gl.(4.58)

$$b = \frac{\pi}{2}\beta_3 \left[1 + \coth \left(\frac{\pi}{2} \frac{\beta_3}{\beta_4} \right) \right]. \quad (4.66)$$

Das Verhalten der Längenparameter (4.58) oder (4.66) als eine Funktion der relativen Potentialstärke γ der beiden Summanden wird in Abb. 4.1 für die Beispiele $m = 2, 3$ und 5 , d.h. $(\alpha, \alpha_1) = (3, 4)$, $(4, 6)$ und $(6, 10)$ veranschaulicht. Gezeigt ist das dimensionslose Verhältnis von b und dem größeren der beiden $\beta_\alpha, \beta_{\alpha_1}$. Wenn man einen kleinen Beitrag eines längerreichweitigen Potentials zu einem dominierenden, aber schneller abfallenden Potentialschwanz addiert, entspricht dies dem Grenzfall kleiner γ ; die Korrektur zum Längenparameter ist wegen (4.61) und (4.66) linear in γ . Große γ erzielt man durch eine kleine Beimischung eines Potentials kürzerer Reichweite zu einem längerreichweitigen; dann ändert sich der Längenparameter gemäß Gl.(4.65) in $O(\gamma^{-2})$, wenn $\alpha > 3$, bzw. nach Gl.(4.66) $\exp(-\pi\gamma)$ für $\alpha = 3$. Die Phasendifferenz $\Phi_- = \Phi_0 - \Phi_1$, die für $\nu < 1$, also $\alpha > 3$, die mittlere Streulänge \bar{a}_0 mit dem Längenparameter b verknüpft (4.42), folgt aus den Gln.(4.54), (4.55):

$$\Phi_- = \pi\nu - 2 \arg \left[\frac{\Gamma \left(\frac{1+\nu-i\gamma\nu}{2} \right)}{\Gamma \left(\frac{1-\nu-i\gamma\nu}{2} \right)} \right]. \quad (4.67)$$

Für kleine γ wird mit (4.59)

$$\Phi_- \stackrel{\gamma \rightarrow 0}{\sim} \pi\nu + 2\gamma c_\nu + O(\gamma^3) = \frac{2\pi}{\alpha_1 - 2} + 2\gamma c_\nu + O(\gamma^3); \quad (4.68)$$

$c_\nu > 0$ wurde in Gl.(4.62) definiert. Aus Gl.(4.63) folgern wir für große γ

$$\Phi_- \stackrel{\gamma \rightarrow \infty}{\sim} 2\pi\nu + O\left(\frac{1}{\gamma^3}\right) = \frac{2\pi}{\alpha - 2} + O\left(\frac{1}{\gamma^3}\right). \quad (4.69)$$

Abb. 4.2 zeigt die Abhängigkeit der Phasendifferenz Φ_- von γ für $m = 3$ [$(\alpha, \alpha_1) = (4, 6)$] und $m = 5$ [$(\alpha, \alpha_1) = (6, 10)$], wie besprochen sieht man, daß die Korrektur für kleine γ linear in γ ist; für kleine $1/\gamma$ ist die Korrektur von höherer Ordnung. Gemäß Gl.(4.41) erhält man die tatsächliche Streulänge aus der mittleren durch Addition von $b/\tan(\pi A)$, d.h. die das Wirkungsintegral zu $E = 0$ enthaltende Konstante A muß bekannt sein. Beispielsweise hat SZMYTKOWSKI [198] analytische Formeln für die Beiträge langreichweitiger Potentiale zur Streulänge angegeben; seine Formeln gelten auch für Potentialschwänze der Gestalt (4.48), (4.49). Dort wird nicht auf die WKB-Methode eingegangen, so daß jene Formeln

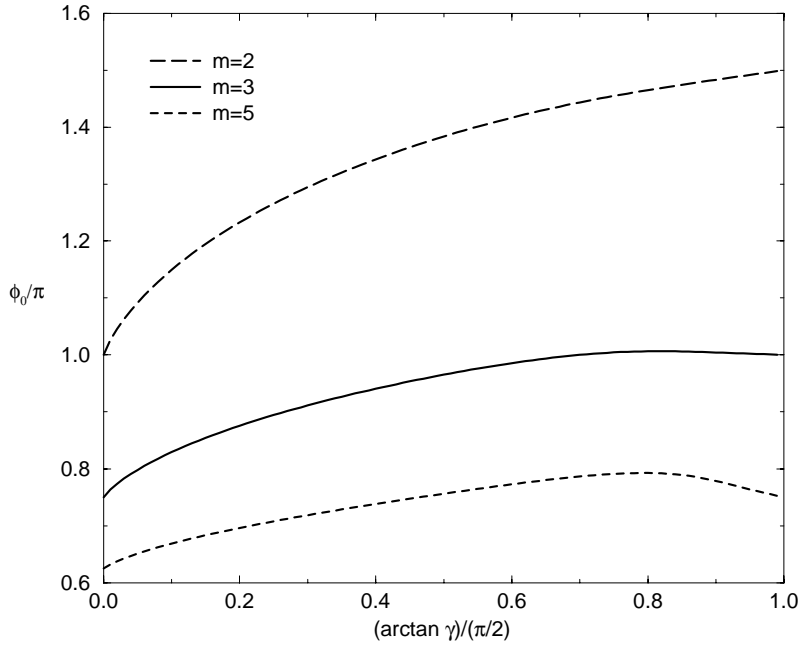


Abbildung 4.3: Abhängigkeit der Reflexionsphase Φ_0 (4.54) bei $E = 0$ vom Potentialverhältnis γ für $m = 2, 3$ und 5 , d.h. $(\alpha, \alpha_1) = (3, 4), (4, 6)$ und $(6, 10)$.

nicht von Wirkungsintegral $S(0)$ abhängen; dafür gibt es einen Beitrag der kurzreichweitigen Potentiale, den man aus den exakten Lösungen der entsprechenden SCHRÖDINGER-Gleichung innerhalb eines bestimmten Radius' berechnet.

In die Quantisierungsregel (4.6) geht A ein (4.16). Außer $S(0)$ benötigt man hierfür die Reflexionsphasen innen und außen, d.h. $\check{\Phi}(0)$ und Φ_0 . Der im Prinzip frei wählbare Energienullpunkt wird durch das Verhalten des Potentials für $r \rightarrow \infty$ bestimmt, am inneren Umkehrpunkt wird dann aber oft die Linearisierung des Potentials und damit die Phasenwahl $\check{\Phi}(0) = \pi/2$ in guter Näherung möglich sein. Φ_0 hängt nur von Potentialschwanz jenseits des WKB-Bereichs ab, Gl.(4.54). Das Verhalten von Φ_0 für kleine γ folgt aus Gl.(4.59),

$$\Phi_0 \stackrel{\gamma \rightarrow 0}{\sim} \frac{\pi}{2}(1 + \nu) - \gamma\nu \ln\left(\frac{\gamma\nu}{2}\right) + \gamma\nu \left[1 + \psi\left(\frac{1 + \nu}{2}\right)\right] + O(\gamma^3). \quad (4.70)$$

Im Falle $\gamma = 0$ liefert nur der erste Term auf der rechten Seite von Gl.(4.70) einen Beitrag $\pi/2 + \pi/(\alpha_1 - 2)$, was mit dem in Gl.(4.22) angegebenen Verhalten

übereinstimmt. Wenn γ groß wird, erhalten wir aus (4.63)

$$\Phi_0 \stackrel{\gamma \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\pi}{2}(1 + 2\nu) + \frac{1}{6\gamma} \left(\frac{1}{\nu} - 3\nu \right) + O\left(\frac{1}{\gamma^3}\right). \quad (4.71)$$

Wird schließlich $1/\gamma = 0$, so resultiert wieder in Übereinstimmung mit Gl.(4.22): $\Phi_0 = \pi/2 + \pi\nu = \pi/2 + \pi/(\alpha - 2)$. Abb. 4.3 zeigt das Verhalten der Reflexionsphase Φ_0 bei $E = 0$ als Funktion von γ für $m = 2, 3$ und 5 , d.h. $(\alpha, \alpha_1) = (3, 4), (4, 6)$ und $(6, 10)$. Für einen homogenen Potentialschwanz $\propto -1/r^\alpha$ ist Φ_0 eine monotone Funktion der Potenz α , siehe Gl.(4.22). Addiert man zu einem kurzreichweitigen Potential einen kleinen Beitrag eines Potentials mit längerer Reichweite hinzu, was dem Fall kleiner γ entspricht, so nimmt Φ_0 gemäß Gl.(4.70) zu, was man auch naiv erwarten würde. Andererseits erhält man bei einer kleinen Beimischung eines kurzreichweitigen Potentials zu einem langreichweitigen Schwanz, also großen γ , nicht unbedingt eine Abnahme von Φ_0 . Aus Gl.(4.71) folgt, daß die zu $1/\gamma$ proportionale führende Korrektur zu Φ_0 nur dann negativ ist, wenn $\nu > 1/\sqrt{3}$, d.h. $m < 1 + \sqrt{3}$ gilt. Für $\nu < 1/\sqrt{3}$, was $m > 1 + \sqrt{3}$ entspricht, ist sie positiv. Wenn $m = 2, \alpha = 3$ gilt, dann führt ein kleiner zusätzlicher Beitrag mit $\alpha_1 = 2m = 4$ zu einer Abnahme von Φ_0 . Für alle ganzzahligen Werte $m \geq 3$ ($\alpha \geq 4$) ändert sich Φ_0 mit von ∞ auf 0 abnehmenden γ nicht monoton; anfangs, für kleine Werte von $1/\gamma$, nimmt Φ_0 zu, um dann wieder abzunehmen.

Für die Reflexion am Potentialschwanz, Gl.(4.27) ist es naheliegend, analog wie im Falle homogener Potentiale, Gl.(3.34), vorzugehen, wenn man sich von niedrigsten Energien lösen will. Dies entspricht also dem Ansatz

$$R = \exp(-4bk), \quad (4.72)$$

wo im vorliegenden Fall b durch Gl.(4.58) gegeben ist; er bedarf noch genauere Erforschung. Eine analoge Untersuchung für die schwelennahe Quantisierung (4.6) im Falle homogener Potentialschwänze befindet sich in der Anfangsphase und beispielsweise im Falle eines VAN DER WAALS-Potentials kann natürlich die säkulare Störungsrechnung [40], mit der wir ja auch bei der Entdeckung der Exponentialregel (3.34), d.h. im analogen Fall bei positiven Energien, gearbeitet haben, wieder benutzt werden.

4.5 Ein Beispiel

Im vorherigen Abschnitt wurden Potentiale, deren Schwänze die Bedingung (4.49) erfüllen und darüberhinaus ausreichend sind, um den Verlauf bei all den großen Werten von r zu beschreiben, wo WKB nicht anwendbar ist, betrachtet. Aus den exakten Lösungen zu $E = 0$ wurden analytische Ausdrücke gewonnen, die angeben, wie die Schwanzparameter vom relativen Gewicht der beiden Summanden abhängen. Hier wollen wir ein numerisches Beispiel für eine Kombination $\alpha = 4$,

$\alpha_1 = 6$, also $m = 3$ und, gemäß (4.50) $\nu = 1/2$, untersuchen. Dies beschreibt etwa die beiden führenden Terme in der langreichweitigen Wechselwirkung eines geladenen Teilchens mit einem polarisierbaren Quantensystem, siehe z.B. [109], [161], [182], [193], [205], sofern dieses nicht entartet ist [173], [174]. Auf letzteren Fall kommen wir im folgenden Kapitel noch einmal zurück. Der Koeffizient $C_4 = \alpha_d/2$ von $-1/r^4$ wird von der Dipol-Polarisierbarkeit α_d festgelegt; der von $-1/r^6$ enthält Beiträge sowohl von der Quadrupol-Polarisation des neutralen Systems, als auch von einer sog. Dispersions-Wechselwirkung [3], [182]. Dadurch, daß

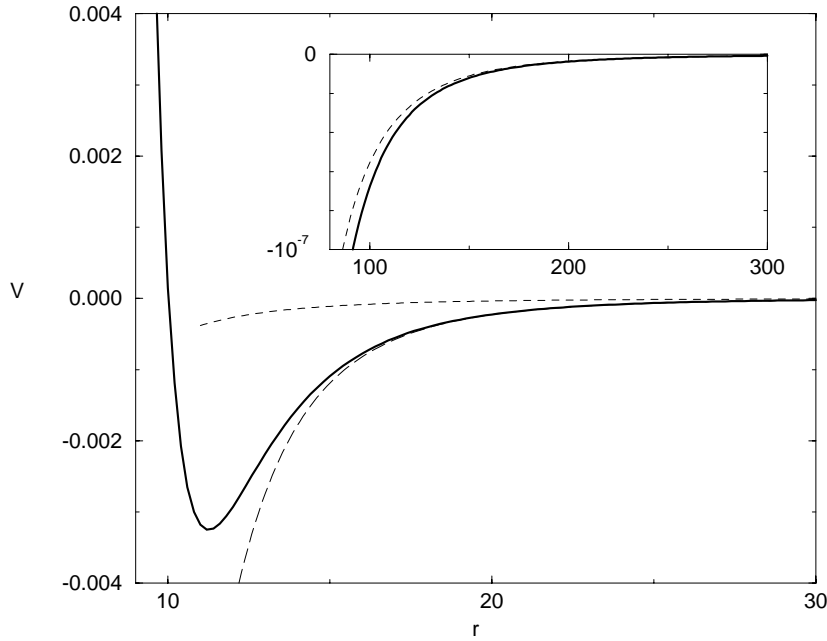


Abbildung 4.4: Modell-Potential (4.73) mit den Parametern $C_4 = 5.55$, $C_6 = 12300$ und $C_{12} = 1.3 \cdot 10^{10}$ (durchgezogen). Die langgestrichelte Kurve zeigt den aus den beiden attraktiven Termen $\propto r^{-4}$ und $\propto r^{-6}$ bestehenden Potentialschwanz; die kurzgestrichelte nur den Summanden $\propto r^{-4}$.

wir zu dem Schwanz (4.48) einen repulsiven Anteil $\propto 1/r^{12}$ addieren,

$$V(r) = \frac{C_{12}}{r^{12}} - \frac{C_6}{r^6} - \frac{C_4}{r^4} = \frac{\hbar^2}{2m_{\text{red}}} \left(\frac{(\beta_{12})^{10}}{r^{12}} - \frac{(\beta_6)^4}{r^6} - \frac{(\beta_4)^2}{r^4} \right), \quad (4.73)$$

wollen wir die Atom-Ion-Wechselwirkung beschreiben. Die längste Reichweite hat der $-r^{-4}$ -Term; seine Stärke soll $C_4 = 5.55$ a.u., das ist die halbe Dipol-Polarisierbarkeit des Argon-Atoms [3], sein; die reduzierte Masse $m_{\text{red}} = 1792.9$ a.u. ist die

eines H^- -Argon-Systems. Für den Koeffizienten des zweiten Anteils im Schwanz wählen wir $C_6 = 12300$ a.u. und damit

$$\beta_4 = 141.07, \quad \beta_6 = 81.493 \quad \Longrightarrow \quad \gamma = \left(\frac{\beta_4}{\beta_6} \right)^2 = 2.997. \quad (4.74)$$

gelten. Die Stärke des repulsiven Teils C_{12} sei $1.3 \cdot 10^{10}$, d.h. $\beta_{12} = 23.3$. Das Modell-Potential ist in Abb. 4.4 gezeigt. Es besitzt zehn gebundene Zustände, wie das kürzlich von LI und LIN [129] für das H^- -Ar-System angegebene. Im Vergleich dazu ist unser Modell-Potential etwas weniger tief, dafür liegt das Minimum bei einem etwas größeren r -Wert. Schon die Anzahl der gebundenen Zustände legt

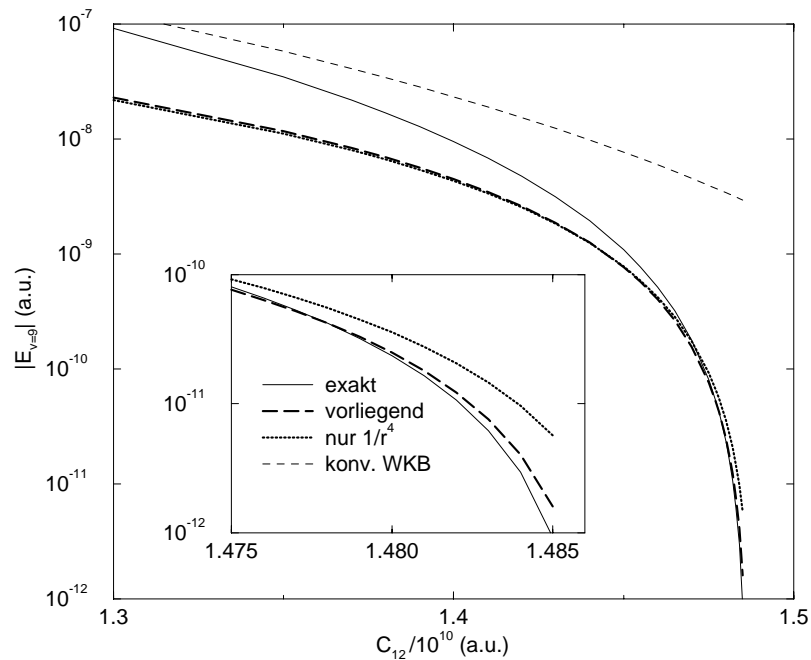


Abbildung 4.5: Bindungsenergien des schwächsten gebundenen Zustands $v = 9$ im Modell-Potential (4.73) mit den Parametern $C_4 = 5.55$, $C_6 = 12300$ als Funktion von C_{12} (durchgezogen). Die langgestrichelte bzw. gepunktete Kurve zeigen die Resultate der Quantisierungsregel (4.6) mit bzw. ohne die Beiträge des r^{-6} Potentials zu den Schwanzparametern. Die aus der herkömmlichen WKB-Methode erhaltenen Bindungsenergien sind gestrichelt veranschaulicht.

nahe, daß die WKB-Näherung im Inneren der Potentialmulde bei $E = 0$ gut ist, eine Rechnung nach Gl.(1.11) bestätigt dies. Der Fehler ist für einen weiten Bereich von r -Werten jenseits des Minimums noch klein, die Annahme eines

WKB-Bereichs damit offensichtlich erfüllt. Wenn wir den Beitrag von $-C_6/r^6$ zum Potential (4.73) vernachlässigen, dann ist der Schwanz homogen mit $\alpha = 4$, woraus für die Schwanzparameter folgt:

$$b \equiv b_4 = \beta_4 = 141.07, \quad \Phi_- = \pi, \quad \Phi_0 = \pi; \quad (4.75)$$

die mittlere Streulänge (4.42) verschwindet in diesem Fall. Das volle Potential (4.74) mit β_4 und β_6 liefert hingegen

$$b = 136.19, \quad \Phi_- = 0.99425 \cdot \pi, \quad \Phi_0 = 1.00626 \cdot \pi, \quad (4.76)$$

also eine kleine positive mittlere Streulänge (4.42)

$$\bar{a}_0 = 1.230 \text{ a.u.} \quad (4.77)$$

Wir untersuchen im folgenden die Anwendbarkeit der in Abschnitt 4.4 entwickelten Quantisierungsregel (4.6) auf den vorliegenden Fall. Variiert wird die Stärke C_{12} des repulsiven Potentials (4.73), und dabei vergleichen wir die exakten Eigenenergien des am schwächsten gebundenen Zustands mit unserer Theorie bis zum Grenzfall $E \rightarrow 0$. Die Ergebnisse sieht man in Abb. 4.5. Der Betrag der exakten Bindungsenergie des zehnten Zustandes ($\nu = 9$) nimmt von ca. 10^{-7} a.u. stark auf Null ab, wenn $C_{12}/10^{10}$ von 1.3 bis 1.49 zunimmt. Die von der herkömmlichen WKB-Methode (4.2) vorhergesagte Bindungsenergie von ca. $3 \cdot 10^{-9}$ ist hier offensichtlich eine wesentlich schlechtere Näherung. Für die in die modifizierte Quantisierungsregel (4.6) eingehende Konstante A wählen wir als Reflexionsphase am inneren Umkehrpunkt die Phase $\pi/2$; die Schwanzparameter b und Φ_0 sind durch (4.75) oder (4.76) gegeben, je nachdem, ob man die Effekte des $1/r^6$ Terms mitnimmt. Die exakte Bindungsenergie und die aus diesen Näherungen erhaltenen Werte sind gezeigt, diese werden ca. bei 10^{-10} a.u. gut. Im Bereich von 10^{-10} bis 10^{-12} a.u. stellt die Berücksichtigung des $1/r^6$ Terms im Potentialschwanz eine beträchtliche Verbesserung dar, wie im vergrößerten Ausschnitt zu sehen ist. Für $C_{12}/10^{10} \geq 1.48$ wird so der Fehler um ca. eine Größenordnung reduziert; der absolute Fehler wird ca. 10^{-12} a.u. oder kleiner. Verglichen mit anderen Energieskalen, wie z.B. dem Niveauabstand $E_{v=9} - E_{v=8} \approx 1.7 \cdot 10^{-6}$ a.u. der obersten Zustände, ist dies sehr klein. Die konventionelle BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung (4.2) liefert einen Fehler der Größenordnung 10^{-8} bis 10^{-9} a.u. in der Bindungsenergie von $E_{v=9}$.

Im nächsten Kapitel wollen wir wieder Überlagerungen von homogenen Potenzialen betrachten, jedoch soll hier ein Summand $\propto r^{-2}$ sein. Im attraktiven Fall entspricht dies dem Radialanteil der Wechselwirkung eines entarteten Systems oder eines Dipols mit einer Ladung; im repulsiven der Zentrifugalbarriere. Die bisher hier beschriebenen Theorien sind nicht in der Lage, die Quantenmechanik dieser speziellen, für die Anwendungen eminent wichtigen Potentiale, im Limes $E \rightarrow 0$ korrekt zu beschreiben.

Kapitel 5

Schwelleneffekte an asymptotischen $\pm r^{-2}$ Potentialen

Dabei bräuchte man nur die unverwüstlichen Gesetze der göttlichen Mathematik anzuwenden

H. ROSENDORFER: Briefe in die chinesische Vergangenheit

In der zweiten Hälfte des 17. Jahrhunderts wurde von CH. HUYGENS und anderen eine Theorie der Zentrifugalkraft und Zentralbewegung geschaffen, die sich als ein tragfähiges Fundament zur Entwicklung der klassischen Dynamik herausstellen sollte. Die resultierende Zentrifugalbarriere $\propto r^{-2}$ behielt ihre Bedeutung auch in der Quantentheorie bei, wo sie für das Verständnis von Reaktionen und Zerfällen eine wichtige Rolle spielte und spielt.

Elektrisch geladene Teilchen können neutrale polarisieren, was in der Regel in hinreichend großen Abständen zu einer anziehenden Wechselwirkung $\propto r^{-4}$ führt. Eine wichtige Ausnahme bilden aber z.B. zwei-Teilchen-COULOMB-Systeme, wie etwa angeregte wasserstoffartige Atome, wo sich aufgrund der l -Entartung in führender Ordnung für ein weiteres Elektron ein *attraktives* Potential $\propto r^{-2}$ einstellt; im Prinzip also eine mit dem *linearen* STARK-Effekt verwandte Erscheinung. Obwohl seit langem diskutiert, sind derartige Potentialschwänze heute von großem Interesse in der Atom-, Molekül- und Quanten-Halo-Physik, siehe etwa [93], [131], [173], [174], [175] und die darin angegebenen Referenzen. Erst jüngst wurden derartige Potentiale unter Zuhilfenahme feldtheoretischer Methoden untersucht [37]. Diese Potentialform entspricht auch dem Radialteil der Wechselwirkung eines permanenten Dipols mit einer Ladung, $-\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}$.

Für die klassische Bewegung im Feld eines Punktdipols wurde etwa gezeigt, daß der Wert $E = 0$ der einzige ist, wo man Bedingungen angeben kann, so daß der Abstand des Teilchens zum Dipol nicht entweder divergiert, oder auf Null abnimmt, um sich nicht wieder zu erhöhen [72].

Wenn ein attraktives Dipolpotential stark genug ist, bindet es unendlich viele Quanten-Zustände, die sogenannte Dipol-Serie, siehe z.B. [121]. Sie wird uns ein

Beispiel dafür liefern, daß sich bei festem Potential die BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung gerade für sehr große Quantenzahlen verschlechtern kann.

Wir betrachten hier Potentiale, die eine Superposition aus einem Anteil $\propto r^{-2}$ und einem singulärem Potential $\propto r^{-s}$, $s > 2$, sind. Wegen ihres Verhaltens am Ursprung werden solche singulären Potentiale manchmal als unphysikalisch betrachtet, jedoch spielen derartige Potentialschwänze seit langem in vielen Bereichen der Physik eine wichtige Rolle und wurden daher intensiv erforscht, siehe z.B. [73]. Sogar prinzipiell exakte Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung für spezielle Potenzen wurden gerade in letzter Zeit publiziert [85], [87].

Wir wollen hier die Energien gebundener Zustände bzw. die Transmissionswahrscheinlichkeiten in der Nähe der Schwelle $E = 0$ für Potentiale, die sich als Superposition eines singulären Anteils $\propto r^{-s}$, $s > 2$ und eines weiteren $\propto r^{-2}$ für hinreichend große Werte von r schreiben lassen, untersuchen. Derartige Situationen wurden in der Vergangenheit mit Hilfe der sogenannten modifizierten Theorie der effektiven Reichweite („*modified effective range theory*“) untersucht, wo man sich die Tatsache zunutze macht, daß man für $s = 4$ die exakte Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung grundsätzlich durch MATHIEU-Funktionen ausdrücken kann [9], [109], [161], [205] und [193]. Weil aber im Limes kleiner Energien normalerweise nur s -Wellen zur Streuung beitragen, werden Zentrifugal-Effekte häufig vernachlässigt [52], [70], [94], [111], [139] und [201]. Trotzdem gibt es eine Reihe von Arbeiten, die diese berücksichtigen, etwa [8], [40], [73], [83], [84], [86], [170], [180], und [198], worauf wir später z.T. noch zurückkommen.

Gerade auch für niedrige Energien können Beiträge höherer Drehimpulse eine wichtige Bedeutung haben, wie man beispielsweise dem WIGNERSchem Schwellengesetz [74] entnehmen kann. Ist ein Vorgang für $l = 0$ durch eine Auswahlregel oder das PAULI-Prinzip unterdrückt, können speziell Zustände mit kleinen, nichtverschwindenden Drehimpulsen wichtig werden. Gerade hier werden die herkömmlichen semiklassischen Methoden jedoch ungenau, wie wir noch sehen werden; dem klassischen Limes entsprechen große Drehimpulse [115]. Daher kann eine Betrachtung des Zentrifugalpotentials auch bei niedrigen Energien durchaus sinnvoll sein; derartige Fragestellungen stoßen gerade in jüngster Zeit auf reges Interesse [182].

Wir wollen also die eindimensionale SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\Psi''(r) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(r)]\Psi(r) = 0, \quad r > 0, \quad (5.1)$$

mit

$$V(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\gamma}{r^2} \pm \frac{\beta_s^{s-2}}{r^s} \right], \quad s > 2, \quad \beta_s > 0 \quad (5.2)$$

für $E \approx 0$ lösen; m ist die reduzierte Masse des Systems. Dies ist auch der geeignete Rahmen, um einige Phänomene, die im Zusammenhang mit kalten Atomen

aufzutreten, zu untersuchen und zu beschreiben, was wir ganz am Ende dieses Kapitels noch kurz ansprechen werden.

Weil die exakten Wellenfunktionen für $E = 0$ bzw. $\beta_s = 0$ bekannt sind [1], ist die folgende Vorgehensweise naheliegend: wir unterteilen die r -Achse in einen inneren $r < \tilde{r}$ und einen äußeren $r > \tilde{r}$ Bereich; die Grenze ist gerade durch die Gleichheit von singulärem Potential und Energie gegeben. Im Sonderfall $s = 4$ hat bereits N.A.W. HOLZWARH [109] auf die Bedeutung dieses Punktes hingewiesen. Wir vernachlässigen in der SCHRÖDINGER-Gleichung die Energie innen und das stärker singuläre Potential außen. Der Wert von \tilde{r} ist so gewählt, daß die vernachlässigten Größen $O(E)$ oder kleiner sind, und da darüberhinaus die Struktur der Wellenfunktionen für kleine E und $r \approx \tilde{r}$ ähnlich sind, haben wir die SCHRÖDINGER-Gleichung in führender Ordnung von E gelöst. Die Ungleichheitszeichen in $r < \tilde{r}$ bzw. $r > \tilde{r}$ sollten dabei nicht zu streng interpretiert werden, wir gehen vielmehr davon aus, daß es eine Umgebung von \tilde{r} gibt, in der beide Approximationen erlaubt sind, was auf Bedingungen führen wird. In dem Bereich, wo das stärker singuläre Potential alle anderen Beiträge dominiert, ist die WKB-Theorie gut erfüllt und kann, falls erforderlich, für weitere Untersuchungen benutzt werden.

Zunächst betrachten wir die Dipolserie im Falle eines attraktiven Potentialschwanzes; später das Tunneln durch die Zentrifugalbarriere.

Die analytisch erhaltenen Serien werden mit numerischen verglichen und die erwartete Konvergenz für kleine Energien bestätigt.

Wir werden hier nur die führenden Terme der entsprechenden Schwellengesetze explizit herleiten und angeben; es stellt sich vor allem beim Tunneln durch die Zentrifugalbarriere heraus, daß die Ermittlung höherer Beiträge zu logischen Problemen führen kann, die wir exemplarisch in dem einfachen, aber praktisch wichtigen Beispiel $s = 4; l = 1$ mit Hilfe einer säkularen Störungsrechnung (POINCARÉ-LINDSTEDT-Methode [68], [204]) beheben; der führende Term ist davon aber nicht betroffen. Bekannte Sonderfälle unserer Potentialform stehen jeweils im Einklang mit unserer Transmissionsformel. Wir vergleichen diese dann mit der semiklassischen Standard-Penetrabilität. Die Divergenz des Wirkungsintegrals nahe der Schwelle erschwert dessen Berechnung. Daher geben wir eine einfache, aber trotzdem streng gültige Abschätzung dafür an, auf deren Basis wir eine Formel herleiten, die einer einfachen und zudem verbesserten Näherung der semiklassischen Tunnelwahrscheinlichkeit entspricht. Wir finden, daß die semiklassische Näherung beträchtliche Fehler aufweisen kann, wie etwa im Fall des VAN DER WAALS-Potentials mit $s = 6$ und $l = 1$ von mindestens 38%. Schließlich werden noch eventuelle Anwendungen unseres Resultates diskutiert.

In der Arbeit [154] wird manchmal eine etwas andere Vorgehensweise und Notation gewählt.

5.1 Dipol-Serie für einen attraktiven Schwanz

Es ist seit langem bekannt, daß ein Potential $-g/r^2$ unendlich viele Quantenzustände binden kann, wenn es hinreichend stark ($g := -\gamma > 1/4$) ist, siehe etwa [121] oder [125]. In diesem Fall ist die relative Lage der Niveaus gegeben durch

$$E_n \stackrel{n \rightarrow \infty}{\cong} -F \exp\left(-\frac{2\pi n}{\sqrt{g - 1/4}}\right) \quad (5.3)$$

mit $n \in \mathbf{Z}$. Ohne weitere Annahmen kann der Wert F als Folge der Skalierungsei-

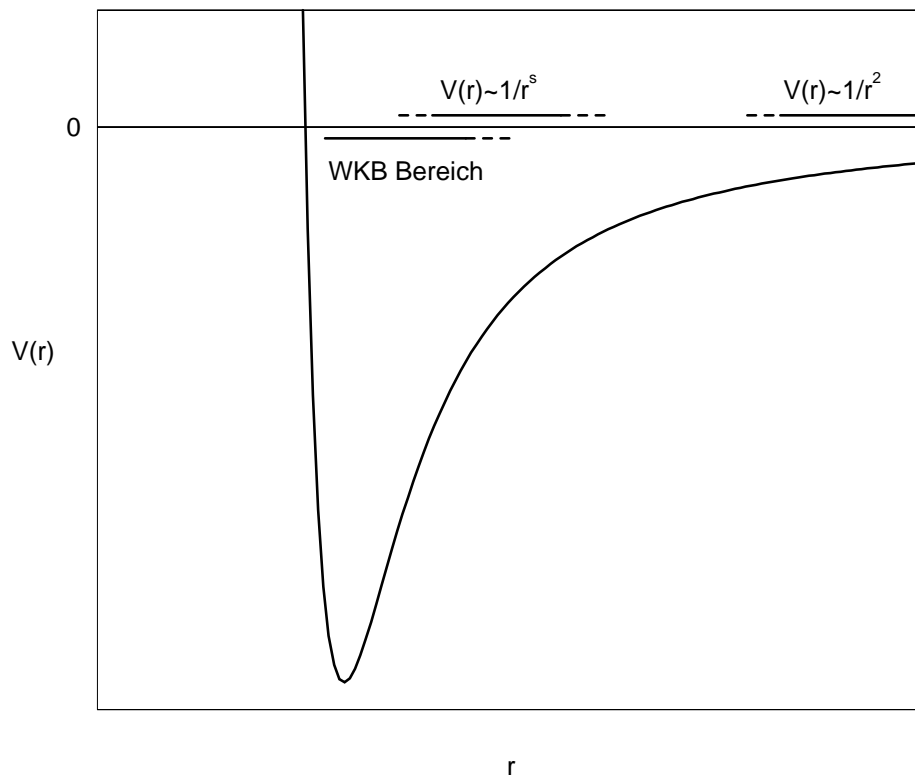


Abbildung 5.1: Schematischer Potentialverlauf bei der Quantisierung (5.15) mit WKB-Innenbereich. Wichtig ist, daß es einen Bereich von der Ausdehnung mehrerer Wellenlängen gibt, in dem WKB eine gute Näherung ist, und gleichzeitig der r^{-s} -Beitrag im Potential dominiert. Hier liegt der Punkt r_m , siehe Gl.(5.12).

genschaften des Systems nicht bestimmt werden, was man durch Einführung einer

reduzierten Koordinate $\rho = \kappa r$ ($\kappa := -2mE/\hbar^2$) leicht sieht [156].

Eine Behandlung weniger attraktiver Potentiale, die hier noch nicht diskutiert werden, findet man z.B. in [18] und [77]; eine Untersuchung derartiger Fälle hinsichtlich der Niveaudichte an der Schwelle wird jedoch vom Autor gerade durchgeführt.

Im Falle $E = 0$ (und $g > 1/4$) sind die exakten Lösungen der entsprechenden SCHRÖDINGER-Gleichung gegeben durch $r^{1/2 \pm i\sqrt{g-1/4}}$. Dies lehrt uns zwei Dinge; erstens, daß WKB nur für $g \gg 1/4$ gut ist (ohne die sogenannte LANGER-Modifikation $g \rightarrow g - 1/4$ [74]; eine Tatsache, die voll mit dem Kriterium für die Anwendbarkeit der WKB-Theorie, Gl.(1.11), übereinstimmt), und zweitens, daß die reellen Wellenfunktionen unendlich viele Knoten nahe $r = 0$ für alle Energien, und entlang der gesamten r -Achse für $E = 0$ haben. Daher können wir annehmen, daß jedes Potential mit einem hinreichend attraktiven Schwanz $\propto r^{-2}$ ein schwellenahes Spektrum wie (5.3) hat. Die Konstante F wird z.B. durch die logarithmische Ableitung der Wellenfunktion an einem Punkt, an dem das stärker singuläre Potential r^{-s} alle anderen Beiträge dominiert, d.h. durch das Verhalten des Potentials bei kleineren Werten von r , festgelegt. Der jetzt zu untersuchende Potentialverlauf ist schematisch in Abb. 5.1 gezeigt; es handelt sich also um eine Überlagerung asymptotisch attraktiver Schwanzterme. Damit wir die erwartete Dipolserie bekommen, nehmen wir im weiteren Verlauf $g > 1/4$ an. Wir interessieren uns für das Spektrum bei $E \approx 0$.

Wie schon angekündigt, definieren wir $\tilde{r} := \beta_s^{1-(2/s)} \kappa^{-2/s}$ und für $r < \tilde{r}$ vernachlässigen wir $E = -\hbar^2 \kappa^2 / 2m$, um die folgende SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{g}{r^2} + \frac{\beta_s^{s-2}}{r^s} \right] M(r) = 0 \quad (5.4)$$

mit $M_{1;2}(r) = r^{1/2} J_{\pm i\xi} \left(\frac{2}{s-2} \left(\frac{\beta_s}{r} \right)^{(s-2)/2} \right)$ und $\xi := \frac{2}{s-2} \sqrt{g-1/4}$ zu erhalten.

Für $r > \tilde{r}$ ist $\frac{\beta_s^{s-2}}{r^s}$ von kleinerem Betrag als der Energie-Term; wir nähern

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{g}{r^2} - \kappa^2 \right] R = 0 \quad (5.5)$$

und erhalten die Lösung

$$R(\kappa r) = i \exp\left(-\frac{\pi}{2}\tau\right) \sqrt{\kappa r} H_{i\tau}^{(1)}(i\kappa r) \quad , \quad (5.6)$$

wo $\tau := \sqrt{g-1/4}$ ist. J und H sind wieder die BESSEL- bzw. HANKEL-Funktionen, wie sie z.B. in [1] definiert sind.

Für $\kappa r \rightarrow \infty$ folgt $R(\kappa r) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp[-\kappa r]$, also das richtige asymptotische Verhalten eines gebundenen Zustands. Im Grenzwert $\kappa r \rightarrow 0$ erhalten wir

$$R(\kappa r) = i(\kappa r)^{1/2} \frac{e^{\pi\tau/2} J_{i\tau}(i\kappa r) - e^{-\pi\tau/2} J_{-i\tau}(i\kappa r)}{\sinh(\pi\tau)} \quad (5.7)$$

$$\sim \sqrt{\frac{\kappa r}{\pi \tau \sinh(\pi \tau)}} e^{-i\theta} \left(\frac{\kappa r}{2}\right)^{i\tau} \left(1 + \frac{\kappa^2 r^2}{4(1+i\tau)}\right) + \\ + \sqrt{\frac{\kappa r}{\pi \tau \sinh(\pi \tau)}} e^{i\theta} \left(\frac{\kappa r}{2}\right)^{-i\tau} \left(1 + \frac{\kappa^2 r^2}{4(1-i\tau)}\right),$$

mit $\theta := \arg \Gamma(i\tau)$. Das Vernachlässigen der höheren Terme relativ zu der Eins ist möglich, wenn $i\tau$ keine ganze Zahl ist (hier ohne Relevanz) und darüberhinaus $(\beta_s \kappa)^{2-(4/s)} \ll 4|1 \pm i\tau|$ gilt.

Bemerkenswert ist, daß die Lösungen $M_{1,2}(r)$ für große $r \rightarrow \infty$ eine vergleichbare r -Abhängigkeit besitzen:

$$M_{1,2}(r) \sim \frac{(s-2)^{\mp i\xi}}{\Gamma(1 \pm i\xi)} \sqrt{r} \left(\frac{\beta_s}{r}\right)^{\pm i\tau} \left(1 - \frac{(\beta_s/r)^{s-2}}{(s-2)^2(1 \pm i\xi)}\right). \quad (5.8)$$

Wieder ist das Vernachlässigen höherer Terme gültig, wenn $i\xi \notin \mathbf{Z}$ und weiter $(\beta_s \kappa)^{2-(4/s)} \ll (s-2)^2|1 \pm i\xi|$ gilt.

In der Nähe von $r = \tilde{r}$ ergibt sich also folgende Linearkombination der Lösungen

$$R = [L \cdot M_1 + L^* \cdot M_2] =: M_\kappa(r) \quad (5.9)$$

mit

$$L := \sqrt{\frac{\kappa}{\pi \tau \sinh(\pi \tau)}} e^{i\theta} \Gamma(1+i\xi)(s-2)^{i\xi} \left(\frac{\kappa \beta_s}{2}\right)^{-i\tau}. \quad (5.10)$$

Daher ist das Verhalten der Lösung bei kleinen $r \approx r_m$ gegeben durch

$$M_\kappa(r) \sim 2\sqrt{\frac{(s-2)\beta_s}{\pi}} \left(\frac{r}{\beta_s}\right)^{s/4} \Re(L \cdot \cos[\rho - i\pi\xi/2 - \pi/4]), \quad (5.11)$$

mit $\rho := 2(r/\beta_s)^{1-(s/2)}/(s-2)$. In diesem Bereich dominiert das singuläre Potential $\propto r^{-s}$ alle anderen Beiträge, wie man z.B. am Vorfaktor $r^{s/4} \propto 1/\sqrt{K(r)}$ und der Tatsache, daß WKB eine hervorragende Näherung ist, sieht. Es ist daher auch ausreichend, die Wellenfunktion nur nach der Phase zu differenzieren; wir erhalten so die logarithmische Ableitung

$$z := \frac{\psi'(r_m)}{\psi(r_m)} = \frac{M'_\kappa(r_m)}{M_\kappa(r_m)} \sim \beta_s^{(s/2)-1} r_m^{-s/2} \frac{L \cdot S + L^* \cdot S^*}{L \cdot C + L^* \cdot C^*}, \quad (5.12)$$

wo S und C durch

$$S := \sin[\rho(r=r_m) - \pi/4 - i\xi\pi/2] \quad \text{und} \\ C := \cos[\rho(r=r_m) - \pi/4 - i\xi\pi/2] \quad (5.13)$$

gegeben sind. Aus den Definitionen von L (5.10) und z (5.12) folgt

$$-L^*/L = e^{2i(\theta+\chi)} (s-2)^{-2i\xi} \left(\frac{\beta_s \kappa}{2}\right)^{2i\tau} = \frac{(\beta_s/r_m)^{s/2} S - \beta_s z C}{(\beta_s/r_m)^{s/2} S^* - \beta_s z C^*}, \quad (5.14)$$

mit $\chi := \arg \Gamma(i\xi)$. Diese schwelennahe Quantisierungsregel ($n \rightarrow \infty$) liefert einen expliziten Ausdruck für die Energieniveaus $-\frac{2m}{\hbar^2} E_n = \kappa_n^2$, wenn man den Wert der logarithmischen Ableitung $z(r_m)$ am Punkt r_m für $E = 0$ (etwa durch *eine* numerische Integration von innen ins erlaubte Gebiet oder durch eine dort bekannte exakte Lösung) kennt:

$$\kappa_n^2 = \left(\frac{2}{\beta_s}\right)^2 (s-2)^{4/(s-2)} \left(\frac{\beta_s^{s/2} S - \beta_s r_m^{s/2} z C}{\beta_s^{s/2} S^* - \beta_s r_m^{s/2} z C^*}\right)^{1/(i\tau)} e^{-2\pi n/\tau}. \quad (5.15)$$

Hierbei ist n eine ganze Zahl und der schon erwartete letzte Faktor wird durch die Mehrdeutigkeit der komplexen Wurzel verursacht.

Die WKB-Näherung ist gut nahe r_m , so daß die von links kommende Wellenfunktion die Form (1.18) $\psi(r_m) \propto K(r_m)^{-1/2} \cos[I]$ hat, mit $I := \int_{\check{r}}^{r_m} K(r') dr' - \check{\Phi}/2$. \check{r} und $\check{\Phi}$ sind wie im letzten Kapitel der innere Umkehrpunkt bzw. die dort entstehende Reflexionsphase. Bei verschwindender Energie ist die Wellenzahl in der Nähe von r_m durch $K(r) = \beta_s^{(s/2)-1} \cdot r^{-s/2}$ gegeben, also ist $I = \text{const.} - \frac{2}{s-2} (r_m/\beta_s)^{1-s/2}$. Deßhalb gilt für die logarithmische Ableitung

$$z = -\beta_s^{(s/2)-1} r_m^{-s/2} \tan[I], \quad (5.16)$$

so daß F und damit das Spektrum (5.15) nicht mehr von r_m abhängen, wie man es erwartet.

Die Konstante F in (5.3) kann also in dieser Situation durch das Verhalten des Potentials bestimmt werden. Wenn man, wie im letzten Kapitel, für das Argument I der WKB-Welle im Innenbereich den Wert bei $E = 0$ nimmt, hat man mit (5.15) und (5.16) einen *expliziten* Ausdruck für die Energie, nicht nur eine implizite Bedingung, wie beispielsweise die BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung. Wie schon erwähnt, reicht *eine* numerische Integration vom inneren Umkehrpunkt nach r_m , die uns die logarithmische Ableitung z verschafft, um das schwelennahe Spektrum in (5.15) festzulegen. Wenn klar ist, daß man die semiklassische Näherung im Innenbereich gut anwenden kann, dann kann man den Ausdruck wie gezeigt weiter vereinfachen.

Interessant ist auch die Betrachtung des Falles eines Potentialtopfes bestehend aus einem attraktiven Schwanz $\propto r^{-2}$, dem ein *repulsives* singuläres Potential überlagert wird. Die SCHRÖDINGER-Gleichung ist demnach

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{g}{r^2} - \frac{\beta_s^{s-2}}{r^s} - \kappa^2 \right] \Psi(r) = 0, \quad (5.17)$$

also näherungsweise innen $r < \tilde{r}$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{g}{r^2} - \frac{\beta_s^{s-2}}{r^s} \right] Z(r) = 0, \quad (5.18)$$

mit der bei $r \rightarrow 0$ verschwindenden Lösung

$$Z(r) = i \exp[-\pi\xi/2] r^{1/2} H_{i\xi}^{(1)} \left(\frac{2i}{s-2} (r/\beta_s)^{(2-s)/2} \right). \quad (5.19)$$

Für $r > \tilde{r}$ bekommen wir wieder die Lösung $R(\kappa r)$, Gl.(5.7).

Damit wird für große r , also kleine Argumente der BESSEL-Funktionen

$$\begin{aligned} Z(r) &= ir^{1/2} \frac{e^{\pi\xi/2} J_{i\xi} \left(\frac{2i}{s-2} (r/\beta_s)^{(2-s)/2} \right) - e^{-\pi\xi/2} J_{-i\xi} \left(\frac{2i}{s-2} (r/\beta_s)^{(2-s)/2} \right)}{\sinh(\pi\xi)} \\ &\sim \sqrt{\frac{r}{\pi\xi \sinh(\pi\xi)}} \left[(s-2)^{i\xi} e^{i\chi} \left(\frac{r}{\beta_s} \right)^{i\tau} + (s-2)^{-i\xi} e^{-i\chi} \left(\frac{r}{\beta_s} \right)^{-i\tau} \right], \end{aligned} \quad (5.20)$$

wo $\chi := \arg \Gamma(i\xi)$ ist und wir die höheren Terme vernachlässigen können, wenn $i\xi \notin \mathbf{Z}$ und $(\beta_s \kappa)^{2-4/s} \ll (s-2)^2 |1 \pm i\xi|$ gilt.

Im Bereich $r \approx \tilde{r}$ kann man so die Proportionalitätskonstante Λ in $Z = \Lambda \cdot R$ sofort wieder eliminieren; denn mit (5.7) und (5.20) haben wir zwei Gleichungen, jeweils eine von $r^{1/2 \pm i\tau}$. Wir finden für $n \rightarrow \infty$ die Quantisierung der Energie:

$$\kappa_n^2 = \frac{4(s-2)^{4/(s-2)}}{\beta_s^2} \exp \left[\frac{2}{\tau} (\theta + \chi - n\pi) \right]. \quad (5.21)$$

Damit können wir den Vorfaktor F in Gl.(5.3) bestimmen:

$$F(s, g) := \frac{2\hbar^2}{m\beta_s^2} (s-2)^{4/(s-2)} e^{2(\theta+\chi)/\tau}. \quad (5.22)$$

Das Problem (5.17) wurde schon früher von anderen Autoren benutzt, um für $s = 4$ die Güte von Approximationsmethoden, wie die $1/N$ -Entwicklung oder WKB höherer Ordnung zu untersuchen [163], [203].

Wie in der Molekülphysik üblich, wurde in der Arbeit von VARSHNI [203], auf die wir uns beziehen wollen, das Potential durch die Lage und den Betrag seines Minimums, r_e und $D_e = -V(r_e)$, parametrisiert. Die Energien werden ebenfalls in Einheiten der Topftiefe angegeben, $\varepsilon_n := E_n/D_e$; diese Größe hängt nur noch von der Stärke g des attraktiven $1/r^2$ Teils des Potentials ab. Der Zusammenhang unserer Parameter g und β_s mit VARSHNIS ist:

$$r_e^2 = 2 \frac{\beta_s^2}{g}, \quad D_e = \frac{\hbar^2 g^2}{8m\beta_s^2}, \quad \eta^2 = \frac{g}{8}. \quad (5.23)$$

Damit gilt $\tau = \sqrt{g-1/4} = \sqrt{8\eta^2-1/4}$, und wir finden das Schwellenverhalten der auf die Topftiefe normierten Energiewerte

$$\varepsilon_n := \frac{E_n}{D_e} = -f e^{-2\pi n/\tau}, \quad f := \frac{F(s=4, g)}{D_e} = \frac{e^{4\theta/\tau}}{\eta^4}. \quad (5.24)$$

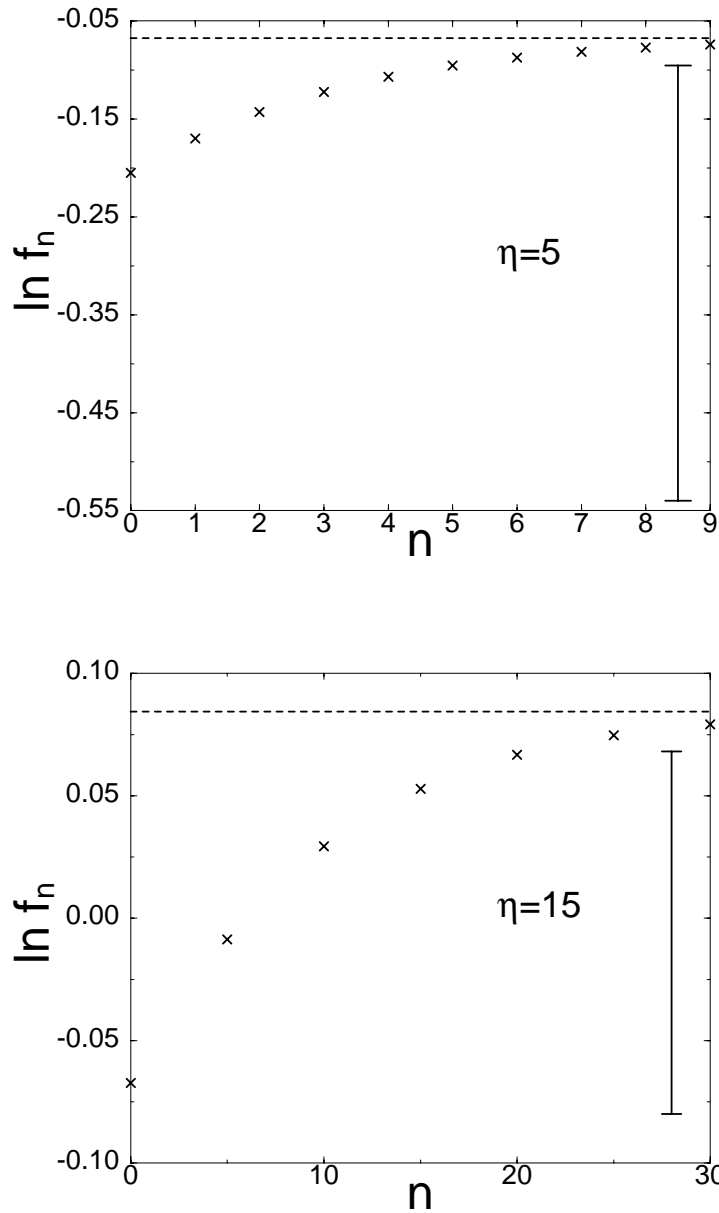


Abbildung 5.2: $\ln f_n$ (5.25) der von VARSHNI berechneten normierten Energieeigenwerte ε_n (5.24) für eine SCHRÖDINGER-Gleichung (5.17) mit $s = 4$ als Funktion der Quantenzahl n . Es sind die beiden Fälle $\eta = 5$ und $\eta = 15$ gezeigt; die gestrichelten horizontalen Linien geben jeweils unseren Grenzwert von f_n , f , an (siehe auch Tab 5.1), der in Gl.(5.24) durch unsere Theorie *modulo* $2\pi/\tau$ festgelegt wird. Entsprechende Intervalle dieser Länge sind durch die senkrechten Balken veranschaulicht. Der Fall $\eta = 25$ ist völlig analog und in [154] zu finden.

Für Potentiale mit $\eta = 5, 15$ und 25 gibt VARSHNI [203] jeweils normierte Eigenenergien ε_n für Quantenzahlen von $n = 0$ (Grundzustand) bis $n = 9, n = 30$ und $n = 55$ an.

Um zu zeigen, wie diese Dipol-Serien für $E \rightarrow 0$ gegen das Verhalten (5.24) konvergieren, tragen wir die Logarithmen $\ln f_n$ der normierten Schwellenfaktoren

$$f_n := -\varepsilon_n \cdot e^{2\pi n/\tau}, \quad (5.25)$$

gegen die Quantenzahl n auf. Im Limes $n \rightarrow \infty$ gilt $f_n \rightarrow f$. Man beachte, daß unsere Theorie, die auf den schwelennahen Wellenfunktionen basiert, f nur bis auf einen Faktor, der eine ganzzahlige Potenz von $\exp(2\pi/\tau)$ ist, festlegt; daher ist $\ln f$ nur *modulo* $2\pi/\tau$ definiert, obwohl natürlich in einem solchen konkreten Beispiel durch den Grundzustand eine eindeutige Zählweise der tatsächlichen Zustände gegeben ist.

Die Resultate für zwei Werte von η sind in Abb. 5.2 veranschaulicht; im dritten Fall $\eta = 25$ ist die Konvergenz ebenso gut, er bringt sonst keine wesentlichen neuen Erkenntnisse; der Leser findet ihn in [154]. Die aus Gl.(5.24) folgenden Werte von $\ln f$ für die drei untersuchten Fälle $\eta = 5, 15$ und 25 findet man in Tabelle 5.1; sie sind als gestrichelte horizontale Linien in Abb. 5.2 eingezeichnet. Die offensichtliche Konvergenz $f_n \rightarrow f$ impliziert, daß die Energien der schwelennahen Zustände für wachsendes n mit zunehmender absoluter und relativer Genauigkeit durch Gl.(5.3) mit dem entsprechenden Vorfaktor (5.22) wiedergegeben werden. Ein bekanntes Analogon hierzu bilden die schwelennahen Energien einer RYDBERG-Serie in einem Potential mit COULOMB-Asymptotik; sie werden mit zunehmender absoluter und relativer Genauigkeit durch die RYDBERG-Formel mit dem entsprechenden Schwellenwert des Quantendefekts beschrieben¹ [74].

Wir weisen noch darauf hin, daß man im Fall $s = 4$ zur Verifikation unseres Vorfaktors (5.22) nicht auf numerische Resultate angewiesen wäre; man hätte hier zumindest in Schwelennähe eine rein analytische Rechnung aufbauend auf den exakten Lösungen mit erträglichem Aufwand durchführen können. Da diese Werte aber nun schon berechnet vorlagen, gaben sie uns die Möglichkeit, die Konvergenzgeschwindigkeit, beginnend beim Grundzustand, zu veranschaulichen.

Die schon früher angesprochene Tatsache, daß die WKB-Quantisierung für Potentialschwänze, die schneller als r^{-2} verschwinden, in Schwelennähe versagt, wurde erst kürzlich als eine Verletzung des BOHRschen Korrespondenzprinzips interpretiert [88], obwohl klar war, daß hier der antiklassische Limes einer sich schnell verändernden Wellenlänge zu erwarten ist. Weil ein derartiger Potentialschwanz

¹Hier gilt auch das Theorem von SEATON, das den Zusammenhang zwischen Streuphase und Quantendefekt bei verschwindender Energie herstellt. Im vorigen Kapitel haben wir für die dort besprochenen Potentiale ebenfalls Verbindungen zwischen schwelennahen gebundenen Zuständen und Streueigenschaften gefunden. Zur Untersuchung etwaiger analoger Zusammenhänge im Fall der Dipolserien dürften die hier gewählten Potentialformen und Methoden eine geeignete Ausgangsbasis bilden.

η	g	$2\pi/\tau$	$\ln f$
5	200	0.444566	-0.0675707
15	1800	0.148106	+0.0843669
25	5000	0.0888599	+0.1142865

Tabelle 5.1: Schwellenwerte von $\ln f$, die gemäß Gl.(5.24) die (auf die Topftiefe normierten) Energieniveaus der durch (5.17) mit $s = 4$ gegebenen Dipolserie festlegen. Sie sind in Abb. 5.2 als gestrichelte horizontale Linien eingezeichnet, gegen welche die aus der Lage von VARSHNIS ε_n berechneten $\ln f_n$ für große Quantenzahlen n konvergieren.

maximal nur endlich viele Zustände binden kann, kann man den BOHRschen Grenzübergang $n \rightarrow \infty$ hier nicht ohne weiteres durchführen. Für Potentiale, die langsamer als r^{-2} für $r \rightarrow \infty$ abfallen, wie etwa die COULOMB-Wechselwirkung, wird der semiklassische Limes an der Schwelle erreicht; ein entsprechender attraktiver Schwanz hat unendliche gebundene Zustände. Fällt das Potential hingegen stärker als r^{-2} ab, gibt es nur maximal endlich viele; die Schwelle $E = 0$ bildet dann den antiklassischen Limes.

Die hier untersuchten Dipolserien stellen als Grenzfall in einer derartigen Diskussion naturgemäß einen interessanten Beitrag dar. Für Potentiale $\propto r^{-2}$ hängt die Güte der semiklassischen Näherung *nicht* von der Energie ab — vielmehr wird der semiklassische Limes durch große Beträge der Potentialstärke überall erreicht, siehe etwa [74], [115] und die Fußnote in Abschn. 2.2. Ein hinreichend attraktiver Schwanz mit $g > 1/4$ bindet unendlich viele Quantenzustände. Wie man VARSHNIS [203] Tabellen entnimmt, werden die relativen Fehler der konventionellen WKB-Quantisierung nahe der Schwelle in allen untersuchten Fällen mit wachsender Quantenzahl zunehmend größer; für WKB höherer Ordnung, die hier grundsätzlich sehr genau ist, kann man aufgrund dieser Daten keine Aussage machen.

Damit sind die Dipolserien in einem Potential mit einem Schwanz $\propto r^{-2}$ typische Beispiele, wo die naive Vorstellung, nach der semiklassische Approximationen im Limes $n \rightarrow \infty$ notwendigerweise besser werden, nicht erfüllt wird. Eine derartig einfältige Handhabung des BOHRschen Korrespondenzprinzips versagt hier. Der semiklassische Limes wird hier, wie bei allen Potentialen $\propto r^{-d}$, $d > 0$, durch große Beträge der Potentialstärke verwirklicht. Im Unterschied zu den schneller abfallenden Potentialen mit $d > 2$ [65] gilt dies hier jedoch auch bei $E = 0$.

Die $1/N$ -Entwicklung ist ein heute etabliertes und häufig sehr erfolgreiches Verfahren zur Ermittlung etwa von Energieniveaus; auch sie kann man ebenfalls als eine semiklassische Methode betrachten, siehe beispielsweise [25]. Für höher angeregte Zustände wird sie im vorliegenden Fall jedoch ebenfalls zunehmend schlechter [203], sie versagt in Schwellennähe völlig. Wie wir gesehen haben, liefert hier unsere Theorie einen einfachen, expliziten und zunehmend besser werdenden Ausdruck

für die Eigenenergien, der umso wertvoller ist, als eine numerische Berechnung dieser Zustandsfolge gerade dann wegen der langen Reichweite des Potentials und der kleinen Energiedifferenzen immer schwieriger wird.

Analoge Rechnungen, wie sie in diesem Abschnitt vorgestellt wurden, jedoch für schwächer attraktive r^{-2} -Potentiale $0 < g < 1/4$, werden vom Autor gerade durchgeführt. Sie sollen vor allem der Aufklärung der Energieabhängigkeit der schwelennahen Niveaudichte dienen und zeigen, wie die in Abschnitt 4.1 angegebenen Formeln $\rho(E) \propto |E|^{-1/2}$ für $d < -2$ und $\rho(E) \propto |E|^{1/d-1/2}$ für $d \geq -2$ durch Variation der Potentialstärke ineinander übergehen.

5.2 Tunneln durch die Zentrifugal-Barriere

Wir betrachten das Problem

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\gamma}{r^2} + \frac{\beta_s^{s-2}}{r^s} + k^2 \right] \Psi(r) = 0, \quad \gamma > -\frac{1}{4}, \quad \beta_s > 0, \quad (5.26)$$

mit $\hbar^2 k^2 / (2m) = E \geq 0$. Unser Ziel wird es sein, hier den führenden Term der schwelennahen Transmissionswahrscheinlichkeit zu bestimmen. Es soll ausdrücklich betont werden, daß die nun entwickelte Theorie strenggenommen auch für $\gamma = 0$ und sogar leicht attraktive Potentiale mit $\gamma > -1/4$ benutzt werden kann. Naheliegende Anwendungen dieser Theorie finden sich in der Untersuchung des Niederengie-Verhaltens realistischer atomarer Systeme, für die die r^{-s} -Potentiale gerade die Wechselwirkungen bei großen Abständen beschreiben (siehe etwa [125] p329 ff oder die Einleitung des vierten Kapitels), während der zweite Potentialbeitrag der Drehimpulsbarriere entspricht.

5.2.1 Naive Herleitung der Schwellentransmission

Wir definieren wie zuvor $\tilde{r} = \beta_s^{1-(2/s)} k^{-2/s}$ und für $r < \tilde{r}$ vernachlässigen wir k^2 , um die folgende SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\gamma}{r^2} + \frac{\beta_s^{s-2}}{r^s} \right] W_{1;2}(r) = 0, \quad (5.27)$$

mit $W_{1;2}(r) = r^{1/2} J_{\pm\nu} \left(\frac{2}{s-2} (r/\beta_s)^{(2-s)/2} \right)$ und $\nu := \frac{2}{s-2} \sqrt{\gamma + 1/4}$ zu erhalten.

Für $r > \tilde{r}$ sehen wir wieder von $\frac{\beta_s^{s-2}}{r^s}$ ab, und bekommen

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\gamma}{r^2} + k^2 \right] Q(kr) = 0, \quad (5.28)$$

mit der Lösung $Q(kr) = \exp[i\pi\mu/2](kr)^{1/2}H_\mu^{(1)}(kr)$, wo $\mu := \sqrt{\gamma + 1/4}$.

Wir schreiben $\gamma = l(l+1)$, und damit gibt es einfache Relationen zwischen der Potentialstärke γ , dem Index μ und der Quantenzahl l (die im Dreidimensionalen dem Drehimpuls entspricht, sofern es außer der Zentrifugalbarriere keine weiteren Beiträge zum r^{-2} -Anteil des Potentials gibt):

$$0 \leq l = -\frac{1}{2} + \sqrt{\gamma + \frac{1}{4}} = \mu - \frac{1}{2}. \quad (5.29)$$

Für $kr \rightarrow \infty$ ist $Q(kr) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp[i(kr - \pi/4)]$, das ist die korrekte Randbedingung für eine auslaufende Welle. Wir weisen nochmals kurz darauf hin, daß die Richtung, in der eine Barriere durchlaufen wird, unerheblich für die Wahrscheinlichkeiten ist (siehe Abschnitt 1.4). Im Limes $kr \rightarrow 0$ wird

$$\begin{aligned} Q(kr) &= i(kr)^{1/2} \frac{e^{-i\pi\mu/2} J_\mu(kr) - e^{i\pi\mu/2} J_{-\mu}(kr)}{\sin(\pi\mu)} \\ &\sim \frac{i}{\sin(\pi\mu)} \frac{e^{-i\pi\mu/2} (kr)^{1/2+\mu}}{2^\mu \Gamma(1+\mu)} \left(1 - \frac{k^2 r^2}{4(1+\mu)}\right) - \\ &\quad - \frac{i}{\sin(\pi\mu)} \frac{e^{i\pi\mu/2} 2^\mu (kr)^{1/2-\mu}}{\Gamma(1-\mu)} \left(1 - \frac{k^2 r^2}{4(1-\mu)}\right), \end{aligned} \quad (5.30)$$

und die Vernachlässigung der quadratischen Terme in der Nähe von \tilde{r} ist relativ zu den Einsen erlaubt, wenn μ keine natürliche Zahl und $(\beta_s k)^{2-(4/s)}/4 \ll |\mu \pm 1| = |l \pm 1/2|$ ist.

Wie im Falle der Dipolserien haben auch hier die Lösungen $W_{1,2}(r)$ eine ähnliche Abhängigkeit von r für große $r \rightarrow \infty$:

$$W_{1,2}(r) \sim \frac{(s-2)^{\mp\nu}}{\Gamma(1 \pm \nu)} \sqrt{r} \left(\frac{r}{\beta_s}\right)^{\mp\mu} \left(1 - \frac{(\beta_s/r)^{s-2}}{(s-2)^2(1 \pm \nu)}\right). \quad (5.31)$$

Die Vernachlässigung ist wieder gültig, wenn $\nu \notin \mathbf{N}$ ($[2l+1]/(s-2) \notin \mathbf{N}$; was insbesondere Probleme für $s=3$ bringt) und $(\beta_s k)^{2-4/s} \ll (s-2)^2 |\nu \pm 1|$ gilt. Wir nehmen also insgesamt nur Terme mit, die sich wie Lösungen einer SCHRÖDINGER-Gleichung zu $E=0$ mit nur dem Zentrifugal-Potential verhalten. Der Fall $\gamma = l=0$ ist hierbei eingeschlossen.

Damit ist in der Nähe von $r = \tilde{r}$:

$$Q = L(\mu, \nu) \cdot W_1 + L(-\mu, -\nu) \cdot W_2, \quad (5.32)$$

wo $L(\mu, \nu)$ durch

$$L(\mu, \nu) := -2^\mu i \frac{\Gamma(1+\nu) e^{i\pi\mu/2} (s-2)^\nu}{\beta_s^\mu \Gamma(1-\mu) \sin(\pi\mu)} k^{1/2-\mu} \quad (5.33)$$

gegeben ist. Wir definieren

$$\begin{aligned} u &:= L(\mu, \nu) \cdot e^{-i\pi\nu/2 - i\pi/4} + L(-\mu, -\nu) \cdot e^{i\pi\nu/2 - i\pi/4} \text{ und} \\ v &:= L(\mu, \nu) \cdot e^{i\pi\nu/2 + i\pi/4} + L(-\mu, -\nu) \cdot e^{-i\pi\nu/2 + i\pi/4}, \end{aligned} \quad (5.34)$$

und erhalten unter Einbeziehung der asymptotischen Entwicklung für kleine r

$$W_{1;2}(r) \sim \sqrt{\frac{(s-2)\beta_s}{\pi}} \left(\frac{r}{\beta_s}\right)^{s/4} \cos \left[\frac{2(r/\beta_s)^{1-s/2}}{s-2} \mp \pi\nu/2 - \pi/4 \right], \quad (5.35)$$

die Wellenfunktion $\psi(r)$ für $r^{1-s/2} \rightarrow \infty$

$$\psi(r) \sim \sqrt{\frac{(s-2)\beta_s}{4\pi}} \left(\frac{r}{\beta_s}\right)^{s/4} (u \cdot \exp[i\rho] + v \cdot \exp[-i\rho]), \quad (5.36)$$

mit $\rho := \frac{2}{s-2}(r/\beta_s)^{1-s/2}$. Aufgrund der Gültigkeit der WKB-Approximation in diesem Bereich kann man die Wellenfunktion wieder *eindeutig* nach Propagationsrichtungen *zerlegen*; eine Anwendung des Impulsoperators auf den ersten Summanden zeigt, daß sich der Anteil $\exp\left[i\frac{2}{s-2}(r/\beta_s)^{1-s/2}\right]$ auf den Ursprung zubewegt, wodurch wir die ein- und auslaufenden Stromdichten $J = \frac{\hbar}{m} \cdot \Im[\Psi^* \partial_r \Psi]$ bestimmen können. Für ein rein eindimensionales Problem ist $J_{out} = \frac{\hbar}{m} \cdot \frac{2k}{\pi}$, $J_{in} = \frac{\hbar}{m} \cdot \frac{(s-2)}{4\pi} v^* v$ und $J_{ref} = -\frac{\hbar}{m} \cdot \frac{(s-2)}{4\pi} u^* u$. Daher ist, wie man durch eine einfache Rechnung leicht einsieht, die Kontinuitätsgleichung erfüllt. Die Wahrscheinlichkeiten für Reflexion R und Transmission T , definiert durch $R := |J_{ref}|/J_{in}$ und $T := J_{out}/J_{in}$ sind somit:

$$\begin{aligned} R &= \frac{u^* u}{v^* v} \quad \text{und} \\ T &= \frac{8k}{(s-2)v^* v}, \quad \text{mit } R + T = 1. \end{aligned} \quad (5.37)$$

Wenn wir unsere SCHRÖDINGER-Gleichung (5.26) als den Radialteil eines dreidimensionalen Problems auffassen, müssen wir zur Berechnung der Stromdichten $\Psi = \psi/r$ setzen; darüberhinaus sind R und T dann über die Ströme, d.h. unter Zuhilfenahme der Flächenelemente in sphärischen Koordinaten zu definieren. Zusammen gibt dies wieder die Wahrscheinlichkeiten (5.37).

Damit ist die Transmission T in führender Ordnung in k gegeben durch:

$$T = \frac{4\pi^2}{(s-2)^{2\nu} \mu\nu [\Gamma(\nu)\Gamma(\mu)]^2} \left(\frac{k\beta_s}{2}\right)^{2\mu} =: P(s, \gamma) \cdot (k\beta_s)^{2\mu}. \quad (5.38)$$

mit $\mu = l + 1/2$ und $\nu = \frac{2}{s-2}(l + 1/2)$.

Für $\gamma = l = 0$, d.h. $\mu = 1/2$ und $s > 2$ wurde die Reflexionswahrscheinlichkeit ja schon besprochen; unter Ausnutzung von $R + T = 1$ erhalten wir völlige

Übereinstimmung mit dem damaligen Resultat (3.23). Dies gilt auch für den praktisch wichtigen [183], [189] Fall $s = 3$.

Darüberhinaus kann man für $\gamma \geq 0$ und $s = 4$ die Transmission T nahe $E = 0$ aus den asymptotischen ($r \rightarrow \pm\infty$; E klein) Formen der Wellenfunktionen, wie sie in [161] gegeben sind, herleiten. Eine etwas längere, aber einfache Rechnung zeigt wieder die völlige Übereinstimmung unserer Formel mit diesem speziellen Fall. Dieses ($s = 4$)-Potential ist für die Wechselwirkung von geladenen Teilchen mit neutralen, aber polarisierbaren von größter Bedeutung, sofern — was der Normalfall ist — keine l -Entartung vorliegt.

Ebenfalls auf rein analytischem Wege könnte man möglicherweise die hier entwickelte Theorie mit den seit kurzem bekannten — leider nicht einfachen — Lösungen für $s = 6$ [85] vergleichen. Weil dadurch die VAN DER WAALS-Wechselwirkung beschrieben wird, ist dieser Fall von herausragender praktischer Bedeutung. Jedoch wurde nach meinem Kenntnisstand auch hierfür die exakte Transmissionsformel in der Literatur noch nicht angegeben.

Den Zusammenhang $T \propto k^{2\mu} \propto E^{l+1/2}$ kann man als WIGNERSches Schwellengestz [74] interpretieren. Weil β_s der einzige Längenparameter ist, war die Proportionalität zu $(\beta_s k)^{2\mu}$ zu erwarten. Unsere Theorie gibt aber darüberhinaus für den praktisch äußerst wichtigen Fall einer Superposition aus einem repulsiven (oder schwach attraktiven) $1/r^2$ und einem attraktiven $1/r^m$ Potential den exakten Koeffizienten $P(s, \gamma)$ an, der in Tabelle 5.2 für einige relevante Fälle zu finden ist.

$P(s, \gamma)$	$s = 3$	$s = 4$	$s = 5$	$s = 6$
$l = 0$	4π	4	2.52537	1.91196
$l = 1$	$\pi/9$	4/9	0.465421	0.464911
$l = 2$	$\pi/32400$	4/2025	0.00527976	0.00849758
$l = 3$	$0.219870 \cdot 10^{-8}$	$0.161250 \cdot 10^{-5}$	0.0000143161	0.0000421688
$l = 4$	$0.865576 \cdot 10^{-14}$	$0.406273 \cdot 10^{-9}$	$0.144770 \cdot 10^{-7}$	$0.856395 \cdot 10^{-7}$
$l = 5$	$0.883151 \cdot 10^{-20}$	$0.414522 \cdot 10^{-13}$	$0.687112 \cdot 10^{-11}$	$0.878061 \cdot 10^{-10}$
$l = 6$	$0.299916 \cdot 10^{-26}$	$0.202710 \cdot 10^{-17}$	$0.176390 \cdot 10^{-14}$	$0.517031 \cdot 10^{-13}$
$l = 7$	$0.402416 \cdot 10^{-33}$	$0.533097 \cdot 10^{-22}$	$0.269760 \cdot 10^{-18}$	$0.190840 \cdot 10^{-16}$
$l = 8$	$0.241743 \cdot 10^{-40}$	$0.819834 \cdot 10^{-27}$	$0.263645 \cdot 10^{-22}$	$0.470489 \cdot 10^{-20}$
$l = 9$	$0.715162 \cdot 10^{-48}$	$0.785816 \cdot 10^{-32}$	$0.173684 \cdot 10^{-26}$	$0.812985 \cdot 10^{-24}$
$l = 10$	$0.112305 \cdot 10^{-55}$	$0.493600 \cdot 10^{-37}$	$0.804279 \cdot 10^{-31}$	$0.102260 \cdot 10^{-27}$

Tabelle 5.2: Werte des Koeffizienten von $(k\beta_s)^{2\mu}$ in der Transmissionsformel (5.38), welche die Penetrabilität durch eine Potentialbarriere, gebildet aus einem attraktiven Anteil $\propto 1/r^s$, $s > 2$ und einem repulsiven γ/r^2 (Zentrifugal-) Potential angibt. Es gilt: $\mu = \sqrt{\gamma + 1/4} = l + 1/2$, wo l die Drehimpulsquantenzahl ist. Die Werte zu $l = 0$ sind uns schon in Abschnitt 3.4 unter der anderen Bezeichnung P_n , aber letztlich im gleichen Zusammenhang, begegnet.

5.2.2 Säkulare Störungsrechnung; Gültigkeit der Transformationsformel

Schon für kleine Werte des Drehimpulses l können Terme, die wir in den Gln.(5.30) und (5.31) vernachlässigt haben, in der Nähe von $r = \tilde{r}$ größer sein, als andere, die wir mitgenommen haben. Eine Möglichkeit der Behebung dieser logischen Inkonsistenz unserer Vorgehensweise werden wir im folgenden unter Zuhilfenahme der säkularen Störungstheorie (auch oft als POINCARÉ-LINDSTEDT-Methode [68], [204] bezeichnet) von M.J. CAVAGNERO am Beispiel $s = 4, l = 1$ ausführlich besprechen.

Im Falle von Gl.(5.30) ist der kleinste Summand, der mitgenommen wird von $O[(kr)^{1/2+\mu}]$, während für den größten vernachlässigten $O[(kr)^{5/2-\mu}]$ im Limes $kr \rightarrow 0$ gilt. Um konsistent zu sein, muß gelten $\mu < 1$, d.h. $l < 1/2$. Trotzdem ist unser Resultat (5.38) auch für $m = 4$ und $l = 0, 1, \dots$ gültig, was man mit den in diesem speziellen Fall bekannten analytischen Lösungen verifiziert, und es ist hier unser Ziel, dieses Paradoxon zu lösen.

In den Gln.(5.31) und (5.32) ist der kleinste mitgenommene Term von $O[(kr)^{1/2+\mu}]$, während der größte vernachlässigte von $O[(kr)^{1/2-\mu}r^{2-s}]$ für $kr \rightarrow 0, r \rightarrow \infty$ ist. Weil wir ja die Entwicklungen nahe $r = \tilde{r} \propto k^{-2/s}$ benötigen, wäre für $s = 4$ der Fall $l = 1$ hierdurch ebenfalls ausgeschlossen.

Wir haben schon gesehen, daß unsere Formel (5.38) auch in Übereinstimmung mit derjenigen von [52] für $s > 2$ und $\gamma = l = 0$ ist, und auch für diese Situation lassen sich solche paradoxen Resultate angeben.

Während die mitgenommenen Terme die gleiche Abhängigkeit von r zeigen, tun dies die vernachlässigten im allgemeinen nicht. Dies bedeutet, daß wir die Näherungen an die Wellenfunktion zu verbessern haben, was wir hier mit der aus der klassischen Mechanik bekannten säkularen Störungstheorie vorhaben, die auch schon in der Atomphysik angewandt wurde [40], [180].

Wir besprechen den einfachen Fall $s = 4, l = 1$ im Detail. Zunächst soll die Wellenfunktion $Q(kr) = \exp[i\pi\mu/2](kr)^{1/2}H_\mu^{(1)}(kr)$ mit $\mu = \sqrt{\gamma + 1/4}$ verbessert werden. Um die volle SCHRÖDINGER-Gleichung (5.26) zu lösen, machen wir den Ansatz $\tilde{Q} = z^{1/2}M(z)$ mit $z = kr$. Wir bekommen

$$\left[z^2 \frac{d^2}{dz^2} + z \frac{d}{dz} + z^2 - \mu^2 \right] M = -\frac{\Delta}{z^2} M, \quad (5.39)$$

hierbei ist $\Delta := \beta_4^2 k^2$ unser Störungsparameter.

Wir beginnen unsere Näherungsprozedur mit folgenden Definitionen: $M(z) = M^{(0)}(z) + \Delta \cdot M^{(1)}(z) + O(\Delta^2)$, und $\mu^2 = \tilde{\mu}^2 + \Delta \cdot \Gamma^{(1)} + O(\Delta^2)$; die Größen $\tilde{\mu}$ und $\Gamma^{(1)}$ werden im folgenden bestimmt. In Ordnung Δ^0 bekommt man die BESSEL-Gleichung zum Index $\tilde{\mu}$ und somit die Lösung $M^{(0)}(z) = H_{\tilde{\mu}}^{(1)}(z)$. Mit Hilfe einer

etwas modifizierten Rekurrenz-Relation für die BESSEL-Funktionen $\mathcal{C}_\alpha(z)$,

$$\frac{\mathcal{C}_\alpha(z)}{z^2} = \frac{\mathcal{C}_{\alpha-2}(z)}{4\alpha(\alpha-1)} + \frac{\mathcal{C}_\alpha(z)}{2(\alpha+1)(\alpha-1)} + \frac{\mathcal{C}_{\alpha+2}(z)}{4\alpha(\alpha+1)}, \quad (5.40)$$

erhält man die Gleichung in Ordnung Δ^1 :

$$\left[z^2 \frac{d^2}{dz^2} + z \frac{d}{dz} + z^2 - \tilde{\mu}^2 \right] M^{(1)} = -\frac{H_{\tilde{\mu}-2}^{(1)}(z)}{4\tilde{\mu}(\tilde{\mu}-1)} - \frac{H_{\tilde{\mu}+2}^{(1)}(z)}{4\tilde{\mu}(\tilde{\mu}+1)}. \quad (5.41)$$

Hier haben wir $\Gamma^{(1)} = 1/(2\tilde{\mu}^2 - 1)$ gewählt, um das Auftreten der Lösung der homogenen Gleichung als Inhomogenität, d.h. als säkulare Störung, zu verhindern. Daher gilt in erster Ordnung in Δ : $\tilde{\mu}^2 = \mu^2 - \Delta/(2\tilde{\mu}^2 - 1)$ (dies ist in der Tat eine — energieabhängige — Änderung des Drehimpulses, also mit einer LANGER-Modifikation vergleichbar). Die Lösung von Gl.(5.41) ist gegeben durch eine Linearkombination der Funktionen auf der rechten Seite und man erhält schließlich:

$$M(z) = H_{\tilde{\mu}}^{(1)}(z) + \frac{(\beta_4 k)^2}{16\tilde{\mu}(\tilde{\mu}-1)^2} H_{\tilde{\mu}-2}^{(1)}(z) - \frac{(\beta_4 k)^2}{16\tilde{\mu}(\tilde{\mu}+1)^2} H_{\tilde{\mu}+2}^{(1)}(z), \quad (5.42)$$

d.h.

$$\tilde{Q}(kr) = e^{i\pi\tilde{\mu}/2} (kr)^{1/2} \left[H_{\tilde{\mu}}^{(1)}(kr) + \frac{(\beta_4 k)^2 H_{\tilde{\mu}-2}^{(1)}(kr)}{16\tilde{\mu}(\tilde{\mu}-1)^2} - \frac{(\beta_4 k)^2 H_{\tilde{\mu}+2}^{(1)}(kr)}{16\tilde{\mu}(\tilde{\mu}+1)^2} \right]. \quad (5.43)$$

Dies ist eine für $r \rightarrow \infty$ auslaufende Welle; die Stromdichte wird durch diese Modifikation in führender Ordnung in k nicht geändert. Diese Näherung geht im Limes $\beta_4^2 k^2 \rightarrow 0$ in das dann exakte Resultat $Q(kr)$ über, mit dem wir schon gearbeitet haben.

Mit der Substitution $z = \beta_4/r$ und dem Ansatz $\tilde{W} = z^{-1/2} \cdot M(z)$ kann man eine ähnliche Rechnung für die $W(r)$ durchführen, das Ergebnis ist

$$\begin{aligned} \tilde{W}_1(r) &= r^{1/2} J_{\tilde{\mu}}(\beta_4/r) + \frac{(\beta_4 k)^2 r^{1/2} J_{\tilde{\mu}-2}(\beta_4/r)}{16\tilde{\mu}(\tilde{\mu}-1)^2} - \frac{(\beta_4 k)^2 r^{1/2} J_{\tilde{\mu}+2}(\beta_4/r)}{16\tilde{\mu}(\tilde{\mu}+1)^2}, \\ \tilde{W}_2(r) &= r^{1/2} J_{-\tilde{\mu}}(\beta_4/r) - \frac{\beta_4^2 k^2 r^{1/2} J_{-\tilde{\mu}-2}(\beta_4/r)}{16\tilde{\mu}(\tilde{\mu}+1)^2} + \frac{\beta_4^2 k^2 r^{1/2} J_{-\tilde{\mu}+2}(\beta_4/r)}{16\tilde{\mu}(\tilde{\mu}-1)^2}. \end{aligned} \quad (5.44)$$

Eine Entwicklung und Überlagerung dieser Terme wie in Gl.(5.32) zeigt, daß in dieser Ordnung der Näherungsrechnung die Vernachlässigung höherer Terme im Fall $\mu = 3/2$, d.h. $l = 1$ logisch korrekt ist. Wir benötigen die Entwicklungen nahe $r = \tilde{r} \propto k^{-1/2}$ und finden, daß wir Terme der Ordnung $o[k]$, ($k \rightarrow 0$) in \tilde{Q} und $L(\pm\mu, \pm\nu) \cdot \tilde{W}_{1;2}$ vernachlässigen können. Eine Berechnung der Ströme gibt dann eine Formel, die in führender Ordnung mit Gl.(5.38) übereinstimmt. Unsere

Methode ist aber grundsätzlich nicht auf die führende Ordnung beschränkt. Wenn man in Gl.(5.30) nur den führenden Term allein (und damit in Gl.(5.31) nur W_1) berücksichtigt, vermeidet man die oben diskutierten Widersprüche von Anfang an und sieht ein, daß Gl.(5.38) tatsächlich für *alle* entsprechenden Potentiale das Schwellenverhalten der Transmission exakt angibt. Dieses Vorgehen ist prinzipiell analog der Herleitung der WKB-Transmissionsformel; in beiden Fällen wird die Kontinuitätsgleichung verletzt; weil man mit einer auslaufenden Wellenfunktion startet, aber mit einer stromlosen reellen endet. Trotzdem kann man diese nach ein- und auslaufenden Strömen zerlegen, und mit Hilfe des auslaufenden Stroms die Transmission bestimmen. Die Verletzung der Kontinuitätsgleichung kann man verstehen, wenn man bedenkt, daß der transmittierte Strom von höherer Ordnung in k als der reflektierte ist. Diese Methode ist jedoch nur geeignet, die führende Ordnung der Transmission zu ermitteln, will man höhere Ordnungen wissen, muß man eine Störungsrechnung durchführen. Speziell für den Fall des VAN DER WAALS-Potentials $s = 6$ wäre dies von großem praktischen Interesse, aber auch mit hohem Aufwand verbunden.

Für kurzreichweitige Potentiale gibt es bei kleinen Energien eine Entwicklung der Streuphase δ_l der Form [siehe auch Gl.(4.29)]

$$k^{2l+1} \cot [\delta_l] = -\frac{1}{a_l} + \frac{1}{2} r_l k^2 + \dots, \quad (5.45)$$

die jedoch im Fall von Potentialschwänzen $\propto r^{-s}$ zusammenbricht; schon beispielsweise die Streulänge a_l kann etwa nur für $s > 2l + 3$ definiert werden, siehe etwa [161], [182], [191]. Man muß sich jedoch klar machen, daß für Potentiale, wie wir sie hier betrachten, diese Entwicklung eigentlich streng nicht gültig ist, da *jede* Linearkombination der Wellenfunktionen am Ursprung verschwindet. Mit von unserer Herleitung unabhängigen Rechnungen haben wir die Gültigkeit unserer Formel (5.38) etwa an den Beispielen $s = 4, \quad l = 0$ und $s = 4, \quad l = 1$ demonstriert, daher kann sie nicht an die Bedingung $s > 2l + 3$ geknüpft sein. Jedoch ist das Auftreten der logischen Inkonsistenzen der naiven Herleitung von derartigen Ungleichungen abhängig, was die Bestimmung höherer Terme der Transmission erschwert.

Wir haben oben betont, daß unsere Penetrabilität (5.38) im Sonderfall $l = 0$ mit dem schon im dritten Kapitel diskutierten Resultat (3.23) übereinstimmt. Ebenfalls für $l = 0$ ist es uns dort durch Anwendung der Exponentialregel (3.34) gelungen, auch das Verhalten in höheren Ordnungen zu erfassen. Eine analytische Rechnung am Beispiel $s = 4$ zeigt nun, daß es hier, bei $l > 0$, nicht mehr einfach nur ausreicht, den führenden Term (5.38) zu kennen, wenn man die Exponentialregel naheliegender verallgemeinert. Denn das Argument der Exponentialfunktion ist nicht mehr durch den führenden Term allein bestimmt, vielmehr kommen hier schon höhere Terme vor, die man erst nach genauerer Rechnung erhält. Die Zuverlässigkeit von über die hier besprochene führende Ordnung hinausgehenden

Formeln für die Penetrabilität, basierend entweder auf solchen verbesserten Wellenfunktionen, oder allgemeineren Überlegungen wie der bekannten Exponentialregel, bleibt eine Herausforderung für die zukünftige analytische und numerische Untersuchung.

5.2.3 Vergleich mit der WKB-Theorie; Anwendungen

Nun wollen wir unser exaktes Resultat mit der WKB-Tunnel-Theorie vergleichen. Für ein reines γ/r^2 -Potential und $E = 0$ sind die Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung durch $r^{1/2 \pm \sqrt{\gamma+1/4}}$ gegeben, was eine sogenannte [123] LANGER-Modifikation $\gamma \rightarrow \mu^2 = \gamma + 1/4$, d.h. $l(l+1) \rightarrow (l+1/2)^2$ nahelegt. Obwohl seit langem praktiziert [22], wurde sie doch gerade auch in jüngster Zeit immer wieder kritisch diskutiert [74], [75], [76] und [96], weil sie das Potential verändert und in die semiklassische Wellenfunktion größere Fehler als nötig bringen kann. Für die Streuung an einem repulsiven Potential $\propto r^{-2}$ ist seit langem klar, daß dem klassischen Limes der Grenzfall großer Potentialstärke, d.h. hoher Drehimpulse, entspricht, siehe etwa [115]. Das Wirkungsintegral ist bei $E = 0$ aufgrund seiner Divergenz nicht einfach auszuwerten, darüberhinaus stellt die durch die WKB-Methode gegebene Transmission Gl.(1.53) lediglich eine Näherung dar, während unsere Theorie — zwar auf diese spezielle Potentialform beschränkt und nur für kleine Energien gültig — exakt in führender Ordnung in k ist. Um einen Eindruck von der Abweichung der WKB-Methode

$$T_{\text{WKB}} = \exp(-2I), \quad I := \int_{\tilde{r}}^{\hat{r}} |K(r)| dr, \quad (5.46)$$

zu bekommen, betrachten wir das Wirkungsintegral I zwischen den klassischen Umkehrpunkten \tilde{r}, \hat{r} ; wir führen darüberhinaus die LANGER-Modifikation durch, um im Endresultat die richtige Energieabhängigkeit zu bekommen:

$$I = \int_{\tilde{r}}^{\hat{r}} \sqrt{\frac{\mu^2}{r^2} - \frac{\beta_s^{s-2}}{r^s} - k^2} dr. \quad (5.47)$$

Der Einfachheit halber berechnen wir es nicht exakt, sondern geben nur eine obere Grenze dafür an². Um dies zu erreichen, teilen wir wieder die r -Achse am Punkt \tilde{r} , der für $k \rightarrow 0$ zwischen \tilde{r} und \hat{r} liegt, und vernachlässigen das singuläre Potential außen und die Energie innen,

$$I \leq I_{\text{approx}} := \int_{r_1}^{\tilde{r}} \sqrt{\frac{\mu^2}{r^2} - \frac{\beta_s^{s-2}}{r^s}} dr + \int_{\tilde{r}}^{r_2} \sqrt{\frac{\mu^2}{r^2} - k^2} dr. \quad (5.48)$$

²Dadurch, daß man in den beiden Teilintegralen von (5.48) den abzuziehenden Term verdoppelt, was aufgrund der speziellen Wahl von \tilde{r} gerade sinnvoll ist, erhält man analog eine untere Schranke für das Wirkungsintegral und so eine obere Schranke (und damit insgesamt ein Intervall) für T_{WKB} .

Die Integrationsgrenzen $r_{1;2}$ sind jetzt so gewählt, daß die neuen Integranden dort verschwinden. Dann ist $r_1 \leq \check{r}$ und $r_2 \geq \hat{r}$, die Ungleichung also konsistent. Die Gln.(1.44) und (1.53) liefern bei Auswertung dieser Integrale im Limes kleiner Energien:

$$T_{WKB} := \Theta^{-2} = \exp[-2I] \geq \exp[-2I_{\text{approx}}] = \left(\frac{e}{2\mu} \right)^{\frac{2s\mu}{s-2}} (k\beta_s)^{2\mu}. \quad (5.49)$$

Durch die mit der LANGER-Modifikation verbundene Änderung im Potential bekommen wir so auch eine vereinfachte WKB-Transmission für $0 \geq \gamma > -1/4$, wenn das wahre Potential also gar keinen repulsiven Anteil und damit keine Barriere besitzt; unsere Theorie ist also anwendbar, solange das LANGER-modifizierte Potential $[l(l+1) \rightarrow (l+1/2)^2]$ für große r repulsiv ist.

In unserem nun schon oft benutzten Beispiel $s = 4$ und $l = 1$, d.h. $\gamma = 2$ bzw. $\mu = 3/2$ gibt dies $T_{WKB} \geq 0.55 \cdot (\beta_4 k)^3$, während unsere Theorie $T = \frac{4}{9}(\beta_4 k)^3$ liefert. Die Abweichung der WKB-Transmission vom exakten Wert beträgt mindestens 24%.

Die WKB-Methode liefert also auch hier zu große Werte für die Transmissionswahrscheinlichkeit, wie das auch bei Barrieren mit endlichem Wirkungsintegral der Fall war. Zur näheren Untersuchung dieser Tatsache definieren wir das Verhältnis

$$G := \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\exp(-2I_{\text{approx}})}{T} = \left(\frac{e^{\mu+\nu} \Gamma(\mu) \Gamma(\nu)}{2\pi \mu^{\mu-1/2} \nu^{\nu-1/2}} \right)^2, \quad (5.50)$$

um das die WKB-Theorie den exakten Wert mindestens überschätzt. Für große Werte von γ bzw. μ oder l zeigt eine Anwendung der STIRLINGSchen Formel auf Gl.(5.38)

$$G \stackrel{\gamma \rightarrow \infty}{\sim} 1 + \frac{s}{12\mu} + O\left(\frac{1}{\mu^2}\right), \quad (5.51)$$

eine zunehmende Übereinstimmung der exakten mit unserer vereinfachten (und doch verbesserten) WKB-Methode (5.49), was nicht zu sehr überraschen sollte, da dies der klassische Limes hoher Drehimpulse $l \gg 1$ ist. Wir haben jedoch schon an obigem Beispiel gesehen, daß die Abweichung für kleinere Werte von γ , also kleine Drehimpulse, beträchtlich sein kann. Tatsächlich nimmt der relative Fehler der WKB-Penetrabilität bei festem γ mit der Potenz s zu, für große s wird er proportional zu s . Im realistischen Fall eines VAN DER WAALS-Potentials mit $s = 6$ mit einer Zentrifugalbarriere zum Drehimpuls $l = 1$ ist die WKB-Transmission mindestens um 38% zu groß. In Abb. 5.3 ist das Verhältnis G für $s = 3, 4, 5, 6$ als Funktion von $\mu = l + 1/2$ dargestellt.

Dort, wo (bei festem s) die Transmission noch vergleichsweise groß und daher wichtig ist, bei kleinen Drehimpulsen also, macht die konventionelle Semiklassik große Fehler, während sie nur stärker unterdrückte Prozesse besser wiedergibt.

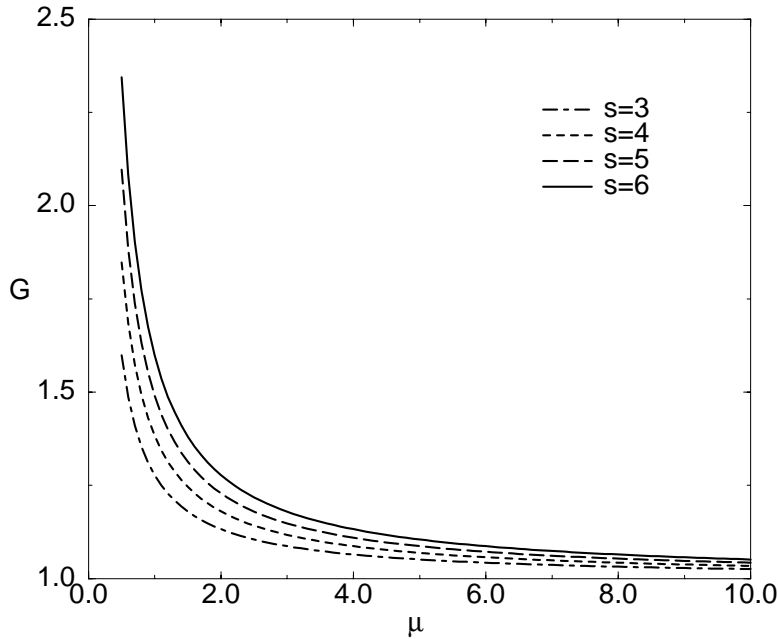


Abbildung 5.3: G aus Gl.(5.50) als Funktion des Parameters μ für $s = 3, 4, 5,$ und 6 . Für die hier betrachtete Potentialform, also eine Superposition aus einem attraktiven Anteil $\propto 1/r^s, s > 2$ und einem Zentrifugalpotential mit Drehimpulsquantenzahl $l = \mu - 1/2$, ist G eine untere Schranke für den Faktor, um den die konventionelle WKB-Penetrabilität (5.49) mit der sogenannten LANGER-Modifikation $l(l+1) \rightarrow (l+1/2)^2$ das exakte Schwellenverhalten der Transmission (5.38) überschätzt.

Wie im zweiten Kapitel werden hier durch die herkömmliche Methode also auch systematisch zu große Penetrabilitäten geliefert, wegen der Divergenz des Wirkungsintegrals gilt aber jetzt wenigstens $T_{WKB} \rightarrow 0$ für $E \rightarrow 0$.

Naheliegende spezielle Anwendungen der hier besprochenen Resultate liegen möglicherweise in der Beschreibung von Dimeren, Clustern bzw. Cluster-Ionen oder Excimern [190] und weiteren Themen aus der Molekül- oder Kernphysik.

Eine fundierte Kenntnis der Transmissionswahrscheinlichkeiten ist also für sehr viele physikalische Fragestellungen wichtig; wir diskutieren hier nur zwei sehr allgemeine Situationen.

Betrachte eine Reaktion, deren Produkt ein Compound-Teilchen ist. Der Wir-

kungsquerschnitt ist dann im wesentlichen gegeben durch (siehe z.B. [26], [112])

$$\sigma_C = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)\pi}{k^2} T_l \quad (5.52)$$

wo die T_l Gl.(5.38) die zum jeweiligen Drehimpuls l gehörenden Transmissionswahrscheinlichkeiten sind. Das einfachste Beispiel einer scharf abgeschnittenen Zentrifugalbarriere findet man etwa in [26]. Im Fall der Streuung zweier realistischer atomarer Systeme repräsentiert das r^{-s} -Potential deren Anziehung. So kann man den Niederenergie-Wirkungsquerschnitt für die Bildung eines Compounds aus einen Anfangszustand mit relativem Drehimpuls l bestimmen. Wegen des WIGNERSchen Schwellengesetzes dominieren nahe der Schwelle die Beiträge kleiner Drehimpulse³. Benutzt man also die übliche semiklassische Transmission, dann wird der Wirkungsquerschnitt, d.h. die gesamte Summe, von deren großen Fehlern verfälscht. Unsere Theorie liefert hingegen das korrekte Schwellenverhalten. Ein anderes wichtiges Beispiel für die Transmission ist der Zerfall eines metastabilen Systems; den Zusammenhang zwischen T und der Zerfallskonstanten λ findet man z.B. in [140]:

$$\lambda = f \cdot T, \quad (5.53)$$

mit der „Anklopfrequenz“ f ; derjenige mit der Breite wurde schon im ersten Kapitel besprochen, Gl.(1.66). Erst kürzlich wurde wieder darauf hingewiesen [192], daß die konventionelle WKB-Methode zwar die Lage von Resonanzen gut wiedergeben kann, aber nicht ausreichend ist, um die Lebensdauern mit hinreichender Genauigkeit zu bestimmen (was mit unserer Beobachtung der Ungenauigkeit der WKB-Transmission übereinstimmt). Wenn die an das Potential gemachten Voraussetzungen gültig sind, ist es sinnvoll, nahe der Schwelle für die Transmission unseren Ausdruck zu verwenden, um extrem scharfe Resonanzen zu beschreiben, wo, wie schon im ersten Kapitel betont, eine direkte numerische Lösung der SCHRODINGER-Gleichung problematisch ist.

Bei kalten Alkali-Atomen können die Streulängen betragsmäßig Werte annehmen, die den BOHRschen Radius um ein Vielfaches, bishin zu Größenordnungen, übertreffen. Im Fall von Cäsium wird seit wenigen Jahren von einer „Zero-Energy Resonance“ gesprochen [10]. Derartige Zustände wurden daher jüngst von B. GAO [89] theoretisch untersucht. Er betrachtet Potentialschwänze, die aus einem attraktiven VAN DER WAALS-Anteil $\propto r^{-6}$ und einer Drehimpulsbarriere bestehen;

³Dies muß nicht zwingend s -Wellen-Streuung sein; für ununterscheidbare Fermionen in Spinsymmetrischen Zuständen ist aufgrund des PAULI-Prinzips die Drehimpulsquantenzahl l ungerade, der führende Beitrag also durch $l = 1$ gegeben. Dies ist insbesondere bei sehr tiefen Temperaturen in Anwesenheit äußerer Magnetfelder von Relevanz, was etwa die Verdampfungskühlung derartiger kalter Atomgase zwar erschwert, das Unterschreiten der FERMI-Temperatur in jüngster Zeit aber nicht verhindern konnte [55]. Gerade hier können sich unsere Methoden also noch als wichtig erweisen.

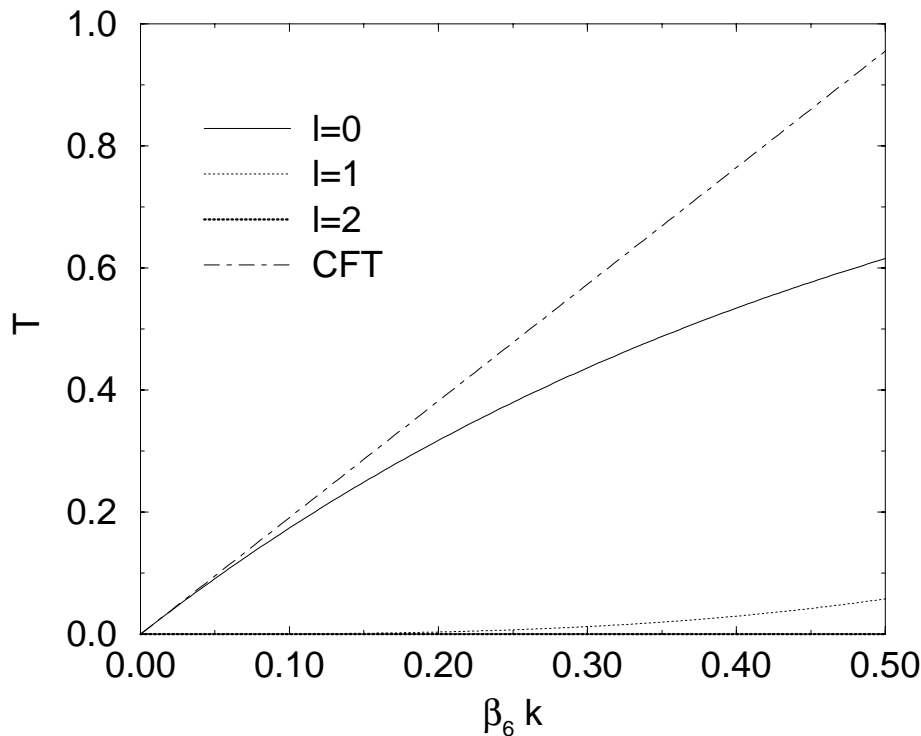


Abbildung 5.4: Transmissionswahrscheinlichkeiten am VAN DER WAALS-Potential $\propto -r^{-6}$ als Funktion der asymptotischen Wellenzahl k . Gezeigt sind die in dieser Arbeit entwickelten Näherungen und das Resultat von CÔTÉ, FRIEDRICH und TROST, Gl.(3.23). Dieses Bild macht klar, daß sich die Exponentialregel (3.33) für $l = 0$ (siehe auch Abb. 3.6) und das hier gefundene Schwellenverhalten (5.38) durchaus ergänzen.

und findet dann folgende Regel: wenn der Potentialtopf beim Drehimpuls l_b einen gebundenen Zustand nahe $E = 0$ hat, dann hat er auch bei $l = l_b \pm 4, \pm 8, \dots$ und $E \approx 0$ weitere, solange $l \geq 0$ gilt. Diese Regel und ihre Verallgemeinerung für *alle* $s > 2$ folgen sofort aus unserer Theorie: unsere Funktion W_1 , die in führender Ordnung die richtige Randbedingung für große r erfüllt, hat das in (5.35) angegebene Verhalten in dem Bereich, in dem das r^{-s} -Potential dominiert; dort hängt sie nur noch über das Argument des Cosinus' $-\nu\pi/2 = -(l + 1/2)\pi/(s - 2)$ vom Drehimpuls ab. Die Anpassung dieser Wellenfunktion an die reguläre vom Ursprung kommende stellt die Quantisierungsbedingung dar. Die Wellenfunktion ändert sich also bis auf das Vorzeichen nicht, wenn sich der Drehimpuls l um ein ganzzahliges Vielfaches von $s - 2$ ändert. Daher folgt aus der Existenz eines

Zustands an der Schwelle mit $l = l_b$ die Existenz von weiteren Zuständen bei $l = l_b \pm (s - 2), \pm 2 \cdot (s - 2), \dots$, solange $l \geq 0$ ist. Damit diese Regel überhaupt gelten kann, muß das Potential bei den kleinen r -Werten, bei denen die Anpassung durchgeführt wird, effektiv unabhängig vom Drehimpuls l sein, was bei endlichen Potentialen für beliebig große l natürlich nicht erfüllt sein kann.

Abb. 5.4 zeigt am Beispiel des VAN DER WAALS-Potentials die vom Autor entwickelten Approximationen der Niederenergie-Transmission für die Drehimpulse $l = 0, 1, 2$. Diese Kurven lehren uns, daß sich die im dritten Kapitel gefundene Exponentialregel und die Ergebnisse dieses Kapitels insofern ergänzen, als man sich sukzessive an höhere Energien heranarbeiten kann, sofern mehrere Drehimpulse zur betreffenden Transmission beitragen. Jedoch macht es auch klar, daß die Kenntnis weiterer Ordnungen, die man hier prinzipiell beispielsweise durch die säkulare Störungsrechnung ermitteln könnte, wünschenswert wäre, um den Kurvenverlauf weiter fortzusetzen; insofern ist das Bild schematisch, als es für $l \neq 0$ nur die jeweils führenden Ordnungen zeigt, für die wir hier eine exakte Theorie entwickelt haben. Unter der naheliegenden Annahme, daß sich die Kurven (zumindest bei nicht zu hohen Energien) nicht schneiden sollen, liefert es Hinweise für eine eventuelle heuristische Verallgemeinerung der Exponentialregel.

Ein System, das etwa aus zwei ununterscheidbaren Teilchen mit Spin Null besteht, kann nur geradzahlige Bahndrehimpulse besitzen [125]. Die ($l = 1$)-Kurve wird demnach aufgrund der Symmetrie der Wellenfunktion irrelevant, so daß man in diesem wichtigen Fall dann mit den hier gefundenen Resultaten schon bis zu recht großen Transmissionswahrscheinlichkeiten und — jedenfalls im Vergleich zur bisherigen Theorie — beträchtlichen Werten des Parameters $\beta_6 k$ sehr einfach, aber präzise rechnen kann. Man kann dies auch anders herum interpretieren: mit den hier beschriebenen Theorien kennt man nicht nur das Schwellenverhalten genau, man kann sogar die folgenden Ordnungen *genau* angeben. Da sie eine in der Praxis sehr wichtige Potentialklasse betreffen, stellen diese Resultate angesichts der Tatsache, daß herkömmliche Schwellengesetze in der Regel nur Aussagen über eine Proportionalität zu einer bestimmten Potenz der Energie machen, einen wesentlichen Fortschritt dar.

Dem Ergebnis von CÔTÉ, FRIEDRICH und TROST, Gl.(3.23), entspricht in diesem Bild die Tangente an die ($l = 0$)-Kurve bei $\beta_6 k = 0$.

Wir haben hier nur eine Superposition bestehend aus einem Term $\propto r^{-2}$ und einem stärker singulären homogenen Anteil $\propto r^{-s}$, $s > 2$ betrachtet. Soll letzterer dahingehend verallgemeinert werden, daß er selbst aus einer Überlagerung von homogenen Anteilen besteht, kann man etwa auf die in [73] angegebenen Lösungen zurückgreifen.

Eine analoge Behandlung des langreichweitigen COULOMB-Potentials mit ähnlichen Methoden wäre erstrebenswert. Wir haben allerdings schon in der Einleitung am Beispiel der RUTHERFORD-Streuung in zwei Dimensionen [155] gesehen, daß bei COULOMB-Systemen der semiklassische Grenzfall gerade bei $E = 0$ zu

erwarten ist. Außerdem fanden wir die größten Abweichungen von T_{WKB} mit der exakten Transmissionswahrscheinlichkeit im Fall von Potentialen, die stärker als $\propto r^{-2}$ verschwinden. Für die Zentrifugalbarriere $\propto r^{-2}$ stimmte immerhin schon die Energieabhängigkeit nach der Durchführung einer LANGER-Modifikation, wenn auch der Vorfaktor speziell bei kleinen Drehimpulsen noch fehlerhaft war. Zusammen nährt dies jedoch die Vermutung, daß die semiklassische Näherung für die Transmission in COULOMB-Systemen nahe der Schwelle tatsächlich zumindest brauchbar ist. Jedoch wäre etwa angesichts der Tatsache, daß beispielsweise der Niederenergie-Wirkungsquerschnitt der Kernreaktion $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$, obwohl von extremer Bedeutung für die Astrophysik, noch immer untersucht und diskutiert wird [35], eine genauere Untersuchung wünschenswert, wobei sich dann die Frage stellt, inwieweit man noch mit einfachen Potentialen arbeiten kann.

Zusammenfassung

Jetzt' konnst as renga lass'n, i hob mein Schbass g'habt

Judith HARTMANN

In dieser Arbeit wurden herkömmliche semiklassische Verfahren so erweitert bzw. eigene entwickelt, daß man sie im extrem quantenmechanischen Grenzfall langer Wellen als Approximationsmethoden benutzen kann. Weiter wurden für spezielle, praxisrelevante Potentialformen analytische Formeln hergeleitet, die das Schwellenverhalten exakt beschreiben.

Das **erste Kapitel** diente zur Vorstellung der Grundlagen. Nach einer kurzen Diskussion verschiedener potentieller Zusammenhänge der klassischen Mechanik und der Quantentheorie wurden mit einem der seit langem bekannten Verfahren die WKB-Funktionen als Näherungen an die Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung hergeleitet. Die ebenfalls seit langem bekannten Zuordnungsregeln, die es uns erlauben, die WKB-Wellenfunktionen trotz deren Divergenz über einen linearen Umkehrpunkt hinweg fortzusetzen, und deren jeweilige Gültigkeit wurden besprochen. Da die Linearisierung des Potentials im Limes langer Wellen aber oft nicht zulässig ist, obwohl der Einsatz der WKB-Approximation sinnvoll sein kann, haben wir die Anschlußregeln durch die Einführung von Phasen und Amplituden modifiziert. Diese hängen normalerweise vom Verlauf des speziellen Potentials im Bereich um den Umkehrpunkt, in dem WKB ungenau ist, und damit auch von der Energie ab. Veranschaulicht wurde dies anhand einiger Beispiele. Wir benutzen nun die WKB-Funktionen, um Randbedingungen an die Wellenfunktion zu formulieren und haben so etwa das Tunnelproblem durch die jetzt in den Zuordnungsvorschriften vorkommenden Amplituden und Phasen parametrisiert. Als eine Anwendung wurde die semiklassische Quantisierung einer Resonanz besprochen. Es wurde auf weitere vielversprechende Situationen zur Anwendung unseres Zugangs hingewiesen.

Im **zweiten Kapitel** haben wir das Tunneln näher untersucht. Hierzu wurden mehrere Methoden vorgestellt; eine basiert auf den modifizierten Anschlußregeln, eine andere auf der Methode der Vergleichspotentiale. Eine unserer Vergleichsmethode recht ähnliche wurde zwar schon vor langer Zeit publiziert, aber meines Wissens noch nie mit numerisch exakten Werten verglichen, was in dieser Arbeit

geschehen ist. Die herkömmlichen semiklassischen Transmissionsformeln konvergieren bei kleinen Energien gegen einen von Null verschiedenen und damit falschen Grenzwert, wenn für $E \rightarrow 0$ das Wirkungsintegral nicht divergiert. Die Methode, die auf der exakten Lösung des Potentialschwanzes bei niedrigen Energien aufbaut, liefert hier bei weitem nicht die besten Resultate. Selbst wenn der Schwanz des Potentials ihre Anwendung grundsätzlich ermöglicht, ist dies nicht hinreichend für gute Qualität, der Potentialverlauf muß in dem gesamten Gebiet, in dem WKB versagt, ausreichend homogen sein. Die Methode der Vergleichspotentiale ist nicht darauf angewiesen, daß das gerade zu untersuchende Potential (wenigstens in Teilbereichen) exakt lösbar ist, vielmehr ist es wesentlich, ein lösbares Potential zu kennen, das dem aktuellen möglichst „ähnlich“ ist. Durch Gleichsetzen der Wirkungsintegrale kann man dann die zu wählende Breite des Vergleichspotentials bestimmen, und damit in dessen Formeln (etwa für die Transmission) eingehen. Dies liefert die gewünschte Näherung. Anhand numerischer Beispiele haben wir gesehen, daß man so (ohne im Vergleich zur herkömmlichen Theorie zusätzlichen Rechenaufwand) realistische Transmissionskurven bekommt auch wenn, wie im Fall einer GAUSS-Barriere, die analytische Lösung der entsprechenden SCHRÖDINGER-Gleichung völlig unbekannt ist. In dem Fall, daß das zu untersuchende Potential ein Sonderfall des Vergleichspotentials für bestimmte Parameterwerte ist, wird natürlich das exakte Resultat reproduziert. Die Approximation, die auf der bekannten analytischen Lösung des Potentialschwanzes bei $E = 0$ aufbaut, liefert nur dann gute Werte, wenn die Energien hinreichend klein und, wie schon erwähnt, das Potential hinreichend homogen ist. In solchen Situationen kann es schwierig werden, die SCHRÖDINGER-Gleichung mit ausreichender Genauigkeit numerisch zu lösen; die Penetrabilitäten sind dann oft extrem klein.

Es ist eine seit langem bekannte Tatsache, daß die übliche semiklassische Transmissionsformel versagt, wenn das Wirkungsintegral über den verbotenen Bereich einer Barriere nur klein ist. Dieser Fall kann mit der Methode der Vergleichspotentiale ebenfalls erfolgreich beschrieben werden; das völlige Versagen der herkömmlichen Theorie wurde in dem untersuchten Beispiel bestätigt.

Gegenstand des **dritten Kapitels** war die klassisch verbotene Reflexion über einer Potentialstufe. Einleitend wurde darauf hingewiesen, daß dieses Problem mathematisch äquivalent zur Änderung der adiabatischen Invarianten des Harmonischen Oszillators und anderen Problemen der Physik ist. Uns interessiert der Bereich knapp über der Barriere, wo die Reflexionswahrscheinlichkeit nahe bei Eins liegt. Es wurden analytisch lösbare Beispiele und, mit deren Hilfe, herkömmliche Approximationsverfahren diskutiert. Semiklassische Methoden, die man in der Literatur findet, versagen bei kleinen Energien, weil sie entweder die Stufenhöhe nicht berücksichtigen oder divergieren. Darüberhinaus sind sie oft nur mühsam anzuwenden. Diese Defizite deuteten in Anbetracht des fundamentalen Charakters und der daraus resultierenden langjährigen Erforschung dieser Problematik auf ein kompliziertes Approximationsschema hin. Es ist daher umso überraschender

und erfreulicher, daß hier mit der WOODS-SAXON-Stufe ein speziell in derartigen Situationen einfaches und doch erstaunlich erfolgreiches Vergleichspotential gefunden wurde. Ein weiteres war das inverse Exponentialpotential, das immerhin für ein Potential mit einem homogenen Schwanz noch deutlich bessere Werte liefern konnte, als eine auf dieser speziellen Form aufbauende in der Wellenzahl lineare Näherung. Der Grund hierfür ist wieder in der Tatsache zu suchen, daß der Schwanz dann in dem gesamten Bereich, in dem WKB versagt und die Reflexion stattfindet, in guter Näherung homogen sein sollte. Dies ist aber nur bei tiefen Potentialstufen der Fall, wo zumindest auf einer Seite dann kurze Wellen auftreten. Die Allgemeinheit meiner Methode wurde wieder an einem Beispiel demonstriert, für das die analytischen Lösungen völlig unbekannt sind. Bisher wurde immer auch versucht, Verfahren zu entwickeln, die möglichst nicht auf spezielle Potentiale beschränkt sind; in der Methode der Vergleichspotentiale ist neben der Potentialhöhe die einzige, vom betreffenden konkreten Problem abhängende Größe, die eingeht, das klassische Wirkungsintegral. Das ist auch in der traditionellen WKB-Näherung der Fall und erklärt deren große Flexibilität und Beliebtheit. Es ist interessant, festzustellen, daß es speziell im antiklassischen Limes erfolgreiche Näherungsmethoden gibt, die einfache Verallgemeinerungen der herkömmlichen Semiklassik sind. Unsere Vorgehensweise war darüberhinaus auch auf keinerlei Ausweichmanöver in die komplexe Ebene angewiesen. Schließlich wurde die für die homogenen Potentiale gültige Näherung auf höhere Ordnungen in der Energie verallgemeinert, was im Rahmen der ursprünglichen Herleitung unmöglich war. Dadurch, daß man das schon bekannte in der Wellenzahl lineare Glied als Argument einer Exponentialfunktion betrachtet, erhält man einen Ausdruck für die Reflexionswahrscheinlichkeit, der sogar schon bei recht kleinen Potenzen des Potentials eine deutliche Verbesserung darstellt, für höhere Potenzen, wie etwa beim VAN DER WAALS-Potential, wird daraus eine hochpräzise Approximation. In den beiden letzten Kapiteln haben wir uns dann speziellen Potentialformen zugewandt, die für die Anwendungen extrem wichtig sind, etwa der Superposition von singulären Schwänzen im **vierten Kapitel**. Grundvoraussetzung war, daß sie für $r \rightarrow \infty$ schneller verschwinden, als r^{-2} , was die Theorie auf s -Wellen begrenzt, und tief genug sind, daß man im Innenbereich WKB anwenden kann. Der asymptotische Bereich, in dem man den tatsächlichen Potentialverlauf in guter Näherung durch den einfacheren Schwanz ersetzen kann, soll sich soweit erstrecken, daß dann die WKB-Approximation verlässliche Resultate liefert. Hier wurde zuerst die BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung und deren phasenkorrigierte Modifikation in einem molekularen Potential nahe $E = 0$, wo die herkömmliche versagt, besprochen. Die darin auftretenden Konstanten wurden durch das Wirkungsintegral bei $E = 0$ und den Verlauf des Potentialschwanzes parametrisiert. Die Niveaudichte divergiert an der Schwelle wie $E^{-1/2}$; die Eigenschaften des Potentialschwanzes gehen in den Vorfaktor ein. Diese Theorie wurde dann an einem Beispiel veranschaulicht. Weiter wurde gezeigt, daß die bei den Zuständen zu

kleiner positiver Energie relevanten Größen, wie etwa die schwelennahe Reflexionswahrscheinlichkeit durch den Längenparameter b , der auch in die Quantisierungsregel und die Niveaudichte eingeht, und nur von asymptotischen Verhalten des Potentials abhängt, beschrieben werden. Kennt man analytische Lösungen des entsprechenden Potentialschwanzes zu $E = 0$, so kann man in führender Ordnung in der Wellenzahl diesen Parameter und die Phasendifferenz Φ_- daraus bestimmen. Mit diesen beiden Größen ist es dann möglich, eine mittlere Streulänge zu definieren. Die tatsächliche Streulänge hängt natürlich vom vollständigen Potentialverlauf ab, der hier über das Wirkungsintegral in einen Parameter A eingeht, welcher auch in der schwelennahen Quantisierung auftritt und die Anzahl der gebundenen Zustände festlegt. Es wurde gezeigt, daß diese ganze Theorie auch etwa für ein attraktives Kastenpotential gilt.

Nimmt man als Potential eine Überlagerung zweier inverser Potenzen, dann gibt es für spezielle Fälle bekannte analytische Lösungen zu $E = 0$. Daraus wurden die entsprechenden Schwanzparameter wie b und Φ_- bestimmt. Anhand eines Beispiels, das einer Superposition aus $1/r^4$ und $1/r^6$ (und damit beispielsweise der Wechselwirkung eines geladenen Teilchens mit einem polarisierbaren) entspricht, wurden die Einfüsse des zweiten Potentials auf die Bindungsenergie des höchsten gebundenen Zustands untersucht, die, wenn sie sehr klein ist, durch die Mitnahme des $1/r^6$ -Terms deutlich verbessert wird. Die Resultate des vierten Kapitels stammen von H. FRIEDRICH und C. ELTSCHKA [65]; hier findet man den betreffenden Stoff aus zwei Gründen: erstens gibt es viele Querverbindungen, die das Bild insgesamt abrunden und zweitens werden durch meine Theorien Verallgemeinerungen nahegelegt, worauf an den entsprechenden Stellen auch hingewiesen wurde.

Schließlich haben wir im **fünften Kapitel** obige Einschränkung, daß das Potential schneller als r^{-2} verschwinden soll, fallengelassen, und uns Superpositionen aus einem solchen und einem stärker singulären Potential zugewandt. Wegen der langen Reichweite divergiert hier gerade das Wirkungsintegral an der Schwelle, was im attraktiven Fall bei ausreichender Potentialstärke unendlich viele gebundene Zustände, die sogenannte Dipolserie, ermöglicht; im repulsiven verschwindet dann die semiklassische Tunnelwahrscheinlichkeit bei $E = 0$. Die analytischen Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung sind bekannt, wenn man entweder die Energie vernachlässigt oder das stärker singuläre Potential. Das macht es naheliegend, sie an einem Punkt, an dem die beiden vernachlässigten Glieder gerade gleich groß sind, aneinander anzupassen. Für einen attraktiven Schwanz wurden so die Quantisierungsregeln (5.15) und (5.21) gefunden, je nachdem, ob das singuläre Potential attraktiv oder repulsiv war. Für den Fall einer Überlagerung aus repulsivem r^{-4} und attraktivem r^{-2} Anteil waren numerische Daten in der Literatur bekannt, weil andere analytische Approximationsmethoden daran getestet wurden. Unser Zugang kann auch schon bei relativ niedrigen Zuständen sehr gute Resultate liefern, ist aber aufgrund seiner Herleitung speziell für höhere, wo der Fehler in der WKB-Approximation und der $1/N$ -Entwicklung zunimmt, und die numerische

Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung wegen der langen Reichweite zu einer sehr mühevollen Aufgabe wird, zugeschnitten. Wir haben mit unserer Methode einen expliziten Ausdruck für die Energie, nicht nur eine implizite Bedingung wie sie etwa die semiklassische Quantisierungsregel darstellt, angegeben. Anhand dieser numerischen Daten wurde die Konvergenz des Spektrums gegen die vorhergesagte schwellennahe Dipolserie bestätigt. Ausgehend von der betrachteten Potentialklasse wurde außerdem diskutiert, daß der Limes hoher Quantenzahlen allein nicht zwingend eine Verbesserung semiklassischer Methoden bedeutet.

Von herausragender praktischer Bedeutung ist der Fall eines repulsiven r^{-2} -Potentials; es entspricht der Zentrifugalbarriere. Durch Überlagerung mit einem attraktiven singulären Potential erhält man so etwa den langreichweitigen Teil der Wechselwirkung zweier atomarer Systeme. Wir haben uns speziell für das Niederenergie-Tunneln durch diese Barriere interessiert. Wieder durch Anpassen der beiden in Teilintervallen der r -Achse bekannten Lösungen wurde in Gl.(5.38) die Penetrabilität gefunden. In bestimmten Sonderfällen konnten die entsprechenden Transmissionen aus anderweitig bekannten analytischen Resultaten berechnet und damit unsere Formel bestätigt werden. Etwa für eine verschwindende Drehimpulsbarriere, also ein reines attraktives singuläres Potential $\propto r^{-s}$, $s > 2$, wurde die Transmission aus dem von CÔTÉ, FRIEDRICH und TROST [52] angegebenen Reflexionskoeffizienten bestimmt, für die Superposition einer Zentrifugalbarriere und einem attraktiven $1/r^4$ -Potential gelang dies aus dem asymptotischen Verhalten der MATHIEU-Funktionen, die dieses Problem exakt lösen und bei O'MALLEY, SPRUCH und ROSENBERG [161] nachzulesen sind. In beiden Fällen wurde völlige Übereinstimmung mit unserem Resultat gefunden. Umso erstaunlicher ist daher die Tatsache, daß unsere Herleitung bei genauer Betrachtung in manchen Fällen logisch inkonsistent erscheint, obwohl sie auch dann die exakten Werte liefert. Denn es werden scheinbar Terme vernachlässigt, die größer sind, als andere, die man berücksichtigt. Mit Hilfe der säkularen Störungsrechnung wurde an einem einfachen Beispiel gezeigt, wie man unsere Herleitung so modifizieren kann, daß sie logisch befriedigend (und sogar über die führende Ordnung hinaus ausbaubar) ist. Der führende Term der Transmission, der uns in der vorliegenden Arbeit hauptsächlich interessierte, kann aber einfacher und trotzdem konsistent dadurch erhalten werden, daß man in der transmittierten Welle alle Terme bis auf den führenden bei kleinen Argumenten vernachlässigt. Der dafür zu zahlende Preis ist eine Verletzung der Kontinuitätsgleichung, die man sich aber dadurch erklären kann, daß der führende Term der Transmission in höherer Ordnung der Energie verschwindet; diese Verletzung also erst in höherer Ordnung auftritt.

Eine einfache Abschätzung ergab, daß in dem Bereich, in dem unsere Penetrabilitätsformel exakt in führender Ordnung in der Energie ist, die übliche WKB-Methode zwar das gleiche Potenzverhalten, aber einen beträchtlich fehlerhaften Vorfaktor liefert; im Limes großer Drehimpulse verschwindet diese Diskrepanz. Hierzu wurde für die besprochene Potentialklasse eine vereinfachte und sogar

verbesserte WKB-Schwellen-Transmissionsformel (5.49) hergeleitet. Compound-Reaktionen und Zerfallsbreiten wurden als mögliche Anwendungen kurz angesprochen.

Eine gerade erst publizierte Regel von B. GAO [89], wonach bei einer Superposition von Drehimpulsbarriere und VAN DER WAALS-Schwanz ein nahe $E = 0, l = l_b$ auftretender Zustand die Existenz analoger schwelennaher Zustände bei anderen Drehimpulsen $l_b \pm 4; 8; \dots$ (solange diese Größe nicht negativ wird) impliziert, wurde verallgemeinert. Für alle singulären Potentiale $\propto r^{-s}, s > 2$ in Verbindung mit der Drehimpulsbarriere konnte mit unserem Formalismus sehr einfach gezeigt werden, daß aus der Existenz eines Zustands mit $l = l_b$ an der Schwelle dort diejenige von weiteren Zuständen bei $l_b \pm (s - 2); 2(s - 2); \dots \geq 0$ folgt; allerdings muß man beachten, daß jeder endlich tiefe Potentialtopf ab einem bestimmten, wenn vielleicht auch sehr hohen Drehimpuls, gar keinen Zustand mehr binden kann; notwendig zur Herleitung der Regel war aber sogar, daß das betreffende Potential einen Bereich besitzt, in dem das stärker singuläre Potential derartig dominiert, daß der Drehimpuls-Beitrag dort unerheblich wird.

Gerade die konzeptionelle Unfähigkeit der bekannten Theorien war die Herausforderung, die mich veranlaßte, gerade diese Themen zu untersuchen, und nicht eine sowohl numerische als auch analytische Sammlung für grundsätzlich schon entwickelte Methoden auf der Basis spezieller Beispiele anzulegen.

Solange sie zur Arbeitsgruppe gehörte, hat mich speziell Frau Dr. P. MEERWALD bei meinen zahllosen Auseinandersetzungen mit der Informationstechnologie ihren Fähigkeiten entsprechend exzellent unterstützt. Auf meine Anfrage hin hat mir Herr Dr. T. PURR liebenswürdigerweise seine Programme zur Berechnung der Dipolserien zur Verfügung gestellt; weil ich aber die Resultate von VARSHNI in der Literatur gefunden habe, hat es sich angeboten, diese zu benutzen und auf diesbezügliche eigene Numerik zu verzichten.

Ich will aber ausdrücklich betonen, daß die numerischen Daten, die die verbotene Reflexion und das Tunneln betreffen, mit von mir selbst entwickelten und geschriebenen Programmen erzielt wurden; wo es möglich war, fanden Konsistenztests mit anderen mir zugänglichen Programmen statt.

Die Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter in Verwaltung, Rechner-Administration und Bibliothek waren immer sehr hilfsbereit und aufgeschlossen.

Diskussionen mit Mitgliedern der Arbeitsgruppe (die mir oft die Schwachstellen der bestehenden Theorien aufzeigten), aber auch mit anderen Wissenschaftlern haben mir bei der Auswahl meiner Themen sehr geholfen und mich mit wertvollem Rüstzeug vertraut gemacht.

Literaturverzeichnis

- [1] M. Abramowitz und I.A. Stegun (eds.), *Handbook of Mathematical Functions*, National Bureau of Standards, 1964; ISBN 0-486-61272-4.
- [2] C.S. Adams, M. Sigel und J. Mlynek, *Atom optics*, Phys. Rep. **240**, 143 (1994).
- [3] R. Ahlrichs, H.J. Böhm, S. Brode, K.T. Tang und J.P. Toennies, *Interaction potentials for alkali ion-rare gas and halogen ion-rare gas systems*, J. Chem. Phys. **88**, 6290 (1988).
- [4] Z. Ahmed, *Tunneling through the Morse barrier*, Phys. Lett. A **157**, 1 (1991).
- [5] Z. Ahmed, *Reflection from a composite potential well*, Phys. Lett. A **236**, 289 (1997).
- [6] Z. Ahmed, *Reflection above potential steps*, J. Phys. A: Math. Gen. **32**, 2767 (1999).
- [7] Z. Ahmed, *Reflection from an interface*, J. Phys. A: Math. Gen. **33**, 3161 (2000).
- [8] M.K. Ali und P.A. Fraser, *The contribution of long-range forces to low-energy phaseshifts*, J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. **10**, 3091 (1977).
- [9] H.H. Aly, H.J.W. Müller-Kirsten und N. Vahedi-Faridi, *Scattering by singular potentials with a perturbation — Theoretical introduction to Mathieu functions*, J. Math. Phys. **16**, 961 (1975).
- [10] M. Arndt, M. Ben Dahan, D. Guéry-Odelin, M.W. Reynolds und J. Dalibard, *Observation of a Zero-Energy Resonance in Cs-Cs Collisions*, Phys. Rev. Lett. **79**, 625 (1997).
- [11] D. Atkatz, *Quantum cosmology for pedestrians*, Am. J. Phys. **62**, 619 (1994).
- [12] A. Auerbach und S. Kivelson, *The Path Decomposition Expansion and Multi-dimensional Tunneling*, Nucl. Phys. B **257**, 799 (1985); C. Bracher, W. Becker, S.A. Gurvitz, M. Kleber und M.S. Marinov, *Three-dimensional tunneling in*

- quantum ballistic motion*, Am. J. Phys. **66**, 38 (1998); S. C. Creagh, *Tunneling in multidimensional systems*, J. Phys. A: Math. Gen. **27**, 4969 (1994). R.E. Meyer, *Observable Tunneling in Several Dimensions*, in: Asymptotic and Computational Analysis, ed. R. Wong, New York, 1990; ISBN 0-8247-8347-6.
- [13] E. Bahar, *Generalized WKB Method with Applications to Problems of Propagation in Nonhomogeneous Media*, J. Math. Phys. **8**, 1735 (1967).
- [14] L.E. Ballentine, *Quantum Mechanics*, Englewood Cliffs, 1990; ISBN 0-13-747932-8.
- [15] L.E. Ballentine, Y. Yang und J.P. Zibin, *Inadequacy of Ehrenfest's Theorem to characterize the classical regime*, Phys. Rev. A **50**, 2854 (1994).
- [16] L.E. Ballentine, *Fractal quantum probability distributions and the classical limit*, Phys. Lett. A **261**, 145 (1999).
- [17] C.M. Bender und S.A. Orszag, *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers*, New York, 1978; ISBN 0-07-004452-X.
- [18] A.A. Berenzin, *Bound states in the field of several noncollapsing inverse square potentials*, Am. J. Phys. **53**, 69 (1985).
- [19] M.V. Berry, *Semiclassically weak reflections above analytic and non-analytic potential barriers*, J. Phys. A: Math. Gen. **15**, 3693 (1982).
- [20] M.V. Berry und C.J. Howls, *Fake Airy functions and the asymptotics of reflectionlessness*, J. Phys. A: Math. Gen. **23**, L243 (1990).
- [21] M.V. Berry und C.J. Howls, *Hyperasymptotics*, Proc. R. Soc. Lond. A **430**, 653 (1990).
- [22] M.V. Berry und K.E. Mount, *Semiclassical approximations in wave mechanics*, Rep. Prog. Phys. **35**, 315 (1972).
- [23] J. Bestle, W.P. Schleich und J.A. Wheeler, *Anti-stealth: WKB grapples with a corner*, Appl. Phys. B **60**, 289 (1995).
- [24] C.F. Bharucha, K.W. Madison, P.R. Morrow, S.R. Wilkinson, B. Sundaram und M.G. Raizen, *Observation of atomic tunneling from an accelerating optical potential*, Phys. Rev. A **55**, R857 (1997).
- [25] N.E.J. Bjerrum-Bohr, *1/N expansions in nonrelativistic quantum mechanics*, J. Math. Phys. **41**, 2515 (2000).
- [26] J.M. Blatt und V.F. Weisskopf, *Theoretical Nuclear Physics*, New York, 1952.

- [27] R. Blümel, T.M. Antonsen, B. Georgeot, E. Ott und R.E. Prange, *Ray Splitting and Quantum Chaos*, Phys. Rev. Lett. **76**, 2476 (1996).
- [28] C. Boisseau, E. Audouard und J. Vigué, *Quantization of the highest levels in a molecular potential*, Europhys. Lett. **41**, 349 (1998); J. Trost, C. Eltschka und H. Friedrich, *Comment on: „Quantization of the highest levels in a molecular potential“*, Europhys. Lett. **43**, 230 (1998).
- [29] C. Boisseau, E. Audouard, J. Vigué und V.V. Flambaum, *Analytical correction to the WKB quantization condition for the highest levels in a molecular potential*, Eur. Phys. J. D **12**, 199 (2000).
- [30] C. Bracher, M. Kleber und M. Riza, *Variational approach to the tunneling-time problem*, Phys. Rev. A **60**, 1864 (1999).
- [31] M. Brack und R.K. Bhaduri, *Semiclassical Physics*, Reading, 1997; ISBN 0-201-48351-3.
- [32] F. Brau, *Bohr-Sommerfeld quantization and meson spectroscopy*, Phys. Rev. D, **62**, 014005 (2000).
- [33] D.M. Brink, *Semi-classical methods for nucleus-nucleus-scattering*, Cambridge, 1985; ISBN 0 521 23940 0.
- [34] A.S. Bruev, *JWKB quantization of the Morse Potential*, Phys. Lett. A **161**, 403 (1992) und *Modification of the JWKB approximation for finding bound state energies*, Phys. Lett. A **161**, 407 (1992).
- [35] C.R. Brune, W.H. Geist, R.W. Kavanagh und K.D. Veal, *Sub-Coulomb α Transfers on ^{12}C and the $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$ S Factor*, Phys. Rev. Lett. **83**, 4025 (1999).
- [36] F.P. Buff, R.A. Lovett und F.H. Stillinger Jr., *Interfacial Density Profile for Fluids in the Critical Region*, Phys. Rev. Lett. **15**, 621 (1965).
- [37] H.E. Camblong, L.N. Epele, H. Fanchiotti, and C.A. Garcia Canal, *Renormalization of the Inverse Square Potential*, Phys. Rev. Lett. **85**, 1590 (2000).
- [38] M. Casas, A. Plastino und A. Puente, *WKB wavefunctions without matching: A self-consistent procedure*, Phys. Rev. A **52**, 949 (1995).
- [39] A. Caticha, *Construction of exactly soluble double-well potentials*, Phys. Rev. A **51**, 4264 (1995); M. Selg, *Exactly Solvable Asymmetric Double-Well Potentials*, Phys. Scripta **62**, 108 (2000).
- [40] M.J. Cavagnero, *Secular perturbation theory of long-range interactions*, Phys. Rev. A **50**, 2841 (1994).

- [41] B. Chakraborty, *The mathematical problem of reflection solved by an extension of the WKB method*, J. Math. Phys. **14**, 188 (1973).
- [42] L.V. Chebotarev, *Transmission spectra for one-dimensional potentials in the semiclassical approximation*, Phys. Rev. A **52**, 107 (1995).
- [43] L.V. Chebotarev, *Error bounds for the Bohr-Sommerfeld formula*, J. Phys. A: Math. Gen. **29**, 7229 (1996).
- [44] L.V. Chebotarev, *Parabolic Connection Formulae in Quantum Mechanics*, Annals of Physics, **255**, 305 (1997).
- [45] L.V. Chebotarev, *The postclassical approximation in quantum tunneling*, Eur. J. Phys. **18**, 188 (1997).
- [46] L.V. Chebotarev, *Extensions of the Bohr-Sommerfeld formula to double-well potentials*, Am. J. Phys. **66**, 1086 (1998).
- [47] L.V. Chebotarev und A. Tchebotareva, *Flat resonances in one-dimensional quantum scattering*, J. Phys. A: Math. Gen. **29**, 7259 (1996).
- [48] M.S. Child, *Semiclassical mechanics with molecular applications*, Oxford, 1991; ISBN 0-19-855654-3.
- [49] B.L. Cohen, *A Simple Treatment of Potential Barrier Penetration*, Am. J. Phys. **33**, 97 (1965).
- [50] E.U. Condon, *Tunneling — how it all started*, Am. J. Phys. **46**, 319 (1978).
- [51] R. Côté, E.J. Heller und A. Dalgarno, *Quantum suppression of cold collisions*, Phys. Rev. A **53**, 234 (1996).
- [52] R. Côté, H. Friedrich und J. Trost, *Reflection above potential steps*, Phys. Rev. A **56**, 1781 (1997).
- [53] M.G.A. Crawford und E.R. Vrscaj, *Generalized coherent states for the Pöschl-Teller potential hole and a classical limit*, Phys. Rev. A **57**, 106 (1998) und R.F. Fox und M.H. Choi, *Generalized coherent states and quantum-classical correspondence*, Phys. Rev. A **61**, 032107 (2000).
- [54] T.O. de Carvalho, *Exact space-time propagator for the step potential*, Phys. Rev. A **47**, 2562 (1993).
- [55] B. DeMarco und D.S. Jin, *Exploring a quantum degenerate gas of fermionic atoms*, Phys. Rev. A **58**, R4267 (1998); B. DeMarco und D.S. Jin, *Onset of Fermi Degeneracy in a Trapped Atomic Gas*, Science **285**, 1703 (1999); DeMarco, J.L. Bohn, J.P. Burke, Jr., M. Holland und D.S. Jin, *Mesurement*

- of p-Wave Threshold Law Using Evaporatively Cooled Fermionic Atoms*, Phys. Rev. Lett. **82**, 4208 (1999).
- [56] E. de Prunelé, *Some asymptotic ($n \rightarrow \infty$) properties of hydrogen-like states $|nlm\rangle$ and on the use of the correspondence principle*, J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. **13**, 3921 (1980).
- [57] A.S. Dickinson, *An approximate treatment of shape resonances in elastic scattering*, Molecular Physics **18**, 441 (1970).
- [58] I.V. Dobrovolska und R.S. Tutik, *Semiclassical treatment of logarithmic perturbation theory*, J. Phys. A: Math. Gen. **32**, 563 (1999).
- [59] P.G. Draizen, *On one-dimensional propagation of long waves*, Proc. R. Soc. Lond. A **273**, 401 (1963).
- [60] B. Durand und L. Durand, *Improved Fermi-Segrè-formula for $|(R_{n,l}/r^l)(0)|^2$ for singular and nonsingular potentials*, Phys. Rev. A **33**, 2899 (1986).
- [61] R. Dutt, A. Khare und U.P. Sukhatme, *Supersymmetry-inspired WKB approximation in quantum mechanics*, Am. J. Phys. **59**, 723 (1991); B. Chakrabarti und T. K. Das, *Quality of the supersymmetric WKB quantization condition for non-shape-invariant potentials*, Phys. Rev. A **60**, 104 (1999); A. Sinha und R. Roychoudhury, *SWKB quantization rules for bound states in quantum wells*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **33**, 1463 (2000).
- [62] C. Eckart, *The Penetration of a Potential Barrier by Electrons*, Phys. Rev. **35**, 1303 (1930).
- [63] W. Elberfeld und M. Kleber, *Time-dependent tunneling through thin barriers: A simple analytical solution*, Am. J. Phys. **56**, 154 (1988); J. León, J. Julve, P. Pitanga und F.J. de Urries, *Time of arrival in the presence of interactions*, Phys. Rev. A **61**, 062101 (2000).
- [64] C. Eltschka, H. Friedrich, M.J. Moritz und J. Trost, *Tunneling near the base of a barrier*, Phys. Rev. A **58**, 856 (1998).
- [65] C. Eltschka, M.J. Moritz und H. Friedrich, *Near-threshold quantization and scattering for deep potentials with attractive tails*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **33** (Special Issue on Coherent Matter Waves), 4033 (2000).
- [66] B.C. Eu und H.G. Guerin, *Correction for the uniform WKB Wave Functions and the WKB Phase Shifts*, Can. J. Phys. **52**, 1805 (1974).
- [67] G. Fält und C. Wilkin, *Bound and unbound wave functions at short distances*, Am. J. Phys. **66**, 876 (1998).

- [68] F.M. Fernández, *Perturbation theory in classical mechanics*, Eur. J. Phys. **18**, 436 (1997).
- [69] G. Firica, *Adiabatic Perturbation Theory; Semiclassical Limit of the Reflection Coefficient on a Potential Barrier*, DESY 93-142, October 1993; ISSN 0418-9833.
- [70] V.V. Flambaum, G.F. Gribakin und C. Harabati, *Analytical calculation of cold-atom scattering*, Phys. Rev. A **59**, 1998 (1999).
- [71] S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics I*, Berlin 1971; ISBN 3-540-05276-3.
- [72] K. Fox, *Classical motion of an electron in an electric-dipole field II: Point dipole case*, J. Phys. A **1**, 124 (1968).
- [73] W.M. Frank, D.J. Land und R.M. Spector, *Singular Potentials*, Rev. Mod. Phys. **43**, 36 (1971).
- [74] H. Friedrich, *Theoretical Atomic Physics*, Berlin, 1998; ISBN 3-540-64124-6.
- [75] H. Friedrich und J. Trost, *Phase loss in WKB Waves Due to Reflection by a Potential*, Phys. Rev. Lett. **76**, 4869 (1996).
- [76] H. Friedrich und J. Trost, *Nonintegral Maslov indices*, Phys. Rev. A **54**, 1136 (1996).
- [77] H. Friedrich und J. Trost, *Accurate WKB wave functions for weakly attractive inverse-square potentials*, Phys. Rev. A **59**, 1683 (1999).
- [78] N. Fröman und P.O. Fröman, *On the History of the so-called WKB-Method from 1817 to 1926*, in: *Semiclassical Descriptions of Atomic and Nuclear Collisions*, Eds. J. Bang und J. de Boer, Amsterdam, 1985; ISBN 0-444-86972-7.
- [79] N. Fröman und P.O. Fröman, *Phase-Integral Method*, New York, 1996; ISBN 0-387-94520-2.
- [80] N. Fröman und P.O. Fröman, *JWKB connection-formula problem revised again via Borel summation*, J. Math. Phys. **39**, 4417 (1998).
- [81] N. Fröman, P.O. Fröman, U. Myhrman und R. Paulsson, *On the Quantal Treatment of the Double-Well Potential Problem by means of Certain Phase-Integral Approximations*, Annals of Physics **74**, 314 (1972).
- [82] A. Galindo und P. Pascual, *Quantum Mechanics II*, New York, 1991; ISBN 0-387-52309-X.
- [83] P.S. Ganas, *Effective-Range Theory for van der Waals Scattering*, Phys. Rev. A **5**, 1684 (1972).

- [84] P.S. Ganas, *Theory of Low-Energy Scattering by a Long-Range r^{-8} Potential*, Phys. Rev. A **6**, 1493 (1972).
- [85] B. Gao, *Solutions of the Schrödinger equation for an attractive $1/r^6$ potential*, Phys. Rev. A **58**, 1728 (1998).
- [86] B. Gao, *Quantum-defect theory of atomic collisions and molecular vibration spectra*, Phys. Rev. A **58**, 4222 (1998).
- [87] B. Gao, *Repulsive $1/r^3$ interaction*, Phys. Rev. A **59**, 2778 (1999).
- [88] B. Gao, *Breakdown of Bohr's Correspondence Principle*, Phys. Rev. Lett. **83**, 4225 (1999); C. Eltschka, H. Friedrich und M.J. Moritz, *Comment on: Breakdown of Bohr's Correspondence Principle*, bei Phys. Rev. Lett. zur Veröffentlichung eingereicht.
- [89] B. Gao, *Zero-energy bound or quasibound states and their implications for diatomic systems with an asymptotic van der Waals interaction*, Phys. Rev. A **62**, 050702(R) (2000).
- [90] A. Garg, *Tunnel splittings for one-dimensional potential wells revisited*, Am. J. Phys. **68**, 430 (2000).
- [91] H. Gingold, *An Invariant Asymptotic Formula for Solutions of Second-Order Linear ODE's*, Asymptotic Analysis **1**, 317 (1988).
- [92] H. Gingold und J. Hu, *Transcendentally small reflection of waves for problems with/without turning points near infinity: A new uniform approach*, J. Math. Phys. **32**, 3278 (1991).
- [93] J. Gómez-Camacho, J.M. Arias und M.A. Nagarajan, *Analytic description of the scattering of electrons by molecules*, Phys. Rev. A **51**, 3799 (1995).
- [94] G.F. Gribakin und V.V. Flambaum, *Calculation of the scattering length in atomic collisions using the semiclassical approximation*, Phys. Rev. A **48**, 546 (1993).
- [95] M.C. Gutzwiller, *Resource Letter ICQM-1: The interplay between Classical and Quantum Mechanics*, Am. J. Phys. **66**, 304 (1998).
- [96] J. Hainz und H. Grabert, *Centrifugal terms in the WKB approximation and semiclassical quantization of hydrogen*, Phys. Rev. A **60**, 1698 (1999).
- [97] R.L. Hall, *A simple interpolation formula for the spectra of power-law and log potentials*, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **26**, 981 (2000).

- [98] J.B. Hartle und S.W. Hawking, *Wave function of the Universe*, Phys. Rev. D **28**, 2960 (1983).
- [99] G.H. Hassoun und D.H. Kobe, *Synthesis of the Planck and Bohr formulations of the correspondence principle*, Am. J. Phys. **57**, 658 (1989).
- [100] C.E. Hecht und J.E. Mayer, *Extension of the WKB equation*, Phys. Rev. **106**, 1156 (1957).
- [101] E.J. Heller und S. Tomsovic, *Postmodern Quantum Mechanics*, Phys. Today **46**, 38 (1993).
- [102] J. Herb, P. Meerwald, M.J. Moritz und H. Friedrich, *Quantum-mechanical deflection function*, Phys. Rev. A **60**, 853 (1999).
- [103] M.H. Holmes, *Introduction to Perturbation Methods*, New York, 1995; ISBN 0-387-94203-3.
- [104] B.R. Holstein und A.R. Swift, *Path integrals and the WKB approximation*, Am. J. Phys. **50**, 829 (1982).
- [105] B.R. Holstein und A.R. Swift, *Barrier penetration via path integrals*, Am. J. Phys. **50**, 833 (1982).
- [106] B.R. Holstein, *Semiclassical treatment of above-barrier scattering*, Am. J. Phys. **52**, 321, (1984).
- [107] B.R. Holstein, *Semiclassical treatment of the double well*, Am. J. Phys. **56**, 338 (1988).
- [108] B.R. Holstein, *Understanding alpha decay*, Am. J. Phys. **64**, 1061 (1996).
- [109] N.A.W. Holzwarth, *Mathieu function solutions to the radial Schrödinger equation for the $-f^2/r^4$ interaction*, J. Math. Phys. **14**, 191 (1973).
- [110] J. Hu und M. Kruskal, *Reflection coefficient beyond all orders for singular problems. I: Separated critical points on the nearest critical level line*, J. Math. Phys. **32**, 2400 (1991) und *Reflection coefficient beyond all orders for singular problems. II: Closed-spaced critical points on the nearest level line*, J. Math. Phys. **32**, 2676 (1991).
- [111] M.J. Jamieson und A. Dalgarno, *How a change in the interaction potential affects the s-wave scattering length*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **31**, L219 (1998).
- [112] P.S. Julienne und J. Vigué, *Cold collisions of ground- and excited-state alkali-metal atoms*, Phys. Rev. A **44**, 4464 (1991).

- [113] M. Kaku, *Quantum field theory*, New York, 1993; ISBN 0-19-507652-4.
- [114] B.M. Karnakov, V.D. Mur und V.S. Popov, *The matching conditions in the WKB method*, JETP **80**, 983 (1995).
- [115] B. Kayser, *Classical Limit of Scattering in a $1/r^2$ Potential*, Am. J. Phys. **42**, 960 (1974).
- [116] J.B. Keller, *Semiclassical Mechanics*, Soc. Industr. Appl. Math. (SIAM) Rev. **27**, 485 (1985).
- [117] J.B. Keller, *Uniform solutions for scattering by a potential barrier and bound states of a potential well*, Am. J. Phys. **54**, 546 (1986).
- [118] E.C. Kemble, *The Fundamental Principles of Quantum Mechanics*, New York, 1937.
- [119] M. Kirilov und M. Trott, *K-space treatment of reflection and transmission at a potential step*, Am. J. Phys. **62**, 553 (1994).
- [120] N. Kiriushcheva und S. Kuzmin, *Scattering of an Gaussian wave packet by a reflectionless potential*, Am. J. Phys. **66**, 867 (1998).
- [121] W. Kirsch und B. Simon, *Corrections to the Classical Behavior of the Number of Bound States of Schrödinger Operators*, Annals of Physics **183**, 122 (1988).
- [122] A.R. Kolovsky, *A Remark on the Problem of Quantum-Classical Correspondence in the Case of Chaotic Dynamics*, Europhys. Lett. **27**, 79 (1994); A. Pérez Ponce, *Comment on „A Remark on the Problem of Quantum-Classical Correspondence in the Case of Chaotic Dynamics“*, Europhys. Lett. **32**, 91 (1995).
- [123] H.A. Kramers, *Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung*, ZS. f. Phys. **39**, 828 (1926).
- [124] A.A. Kvitsinsky und S. Putterman, *Exponentially suppressed transitions in an adiabatically driven quantum system with a discrete spectrum*, Phys. Rev. A **42**, 6303 (1990).
- [125] L.D. Landau und E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik, Band III: Quantenmechanik*, Berlin, 1979; ISBN 3-05-500067-6.
- [126] R. Landauer, *Reflections in one-Dimensional Wave Mechanics*, Phys. Rev. **82**, 80 (1951).
- [127] J. Lekner, *Theory of Reflection*, Dordrecht, 1987; ISBN 90-247-3418-5.

- [128] C. Leubner, M. Alber und N. Schupfer, *Critique and correction of the textbook comparison between classical and quantum harmonic oscillator probability densities*, Am. J. Phys. **56**, 1123 (1988).
- [129] Y. Li und C.D. Lin, *Calculations of some weakly bound diatomic molecular negative ions*, Phys. Rev. A **60**, 2009 (1999).
- [130] R.L. Liboff, *The correspondence principle revisited*, Phys. Today **37**, 50 (1984).
- [131] E. Lindroth, A. Bürgers und N. Brandefelt, *Relativistic effects on the H^- resonances converging to the $H(n = 2)$ threshold*, Phys. Rev. A **57**, R685 (1998).
- [132] Qu.-H. Liu, *The classical limit of quantum mechanics and the Fejér sum of the Fourier series expansion of a classical quantity*, J. Phys. A: Math. Gen. **32**, L57 (1999).
- [133] C.L. Lopreore und R.E. Wyatt, *Quantum wave packet dynamics with trajectories: reflections on a downhill ramp potential*, Chem. Phys. Lett. **325**, 73 (2000).
- [134] S.-C. Lu, Y. Chen, F. Sun und B. Wang, *Perturbation-WKB approximation: Quartic anharmonic oscillator*, Il Nouv. Cim. **113B**, 375 (1998).
- [135] S.-C. Lu und B. Wang, *Perturbation-WKB approximation: quantum defect for highly excited states of alkali metal atom*, Il Nouv. Cim. **114B**, 621 (1999).
- [136] N.T. Maitra und E.J. Heller, *Semiclassical perturbation approach to quantum reflection*, Phys. Rev. A **54**, 4763 (1996).
- [137] N.T. Maitra und E.J. Heller, *Barrier Tunneling and Reflection in the Time and Energy Domains: The Battle of the Exponentials*, Phys. Rev. Lett. **78**, 3035 (1997).
- [138] V.I. Man'ko und T. Seligman, *Adiabatic Theorem Violation for Degenerate Energy Levels*, Phys. Scripta **60**, 139 (1999).
- [139] M. Marinescu, *Computation of the scattering length and effective range in molecular physics*, Phys. Rev. A **50**, 3177 (1994).
- [140] P. Marmier und E. Sheldon, *Physics of Nuclei and Particles, Vol I* (Academic Press, New York and London, 1969).
- [141] V.P. Maslov und M.V. Fedorjuk, *Semi-classical approximations in quantum mechanics*, Dordrecht, 1981; ISBN 0-9277-1219-9.

- [142] J. J. McClelland und M. Prentiss, *Atom Optics: Using Light to Position Atoms*, in: Nanotechnology (Hrsg.: G. Timp), New York, 1999; ISBN 0-387-98334-1.
- [143] D.W. McLaughlin, *Complex Time, Contour Independent Path Integrals, and Barrier Penetration*, J. Math. Phys. **13**, 1099 (1972).
- [144] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, New York; 1970.
- [145] A. Messiah, *Quantenmechanik, Band 1*, Berlin, 1991; ISBN 3 11 011452 6.
- [146] R.E. Meyer, *Gradual Reflection of Short Waves*, Soc. Industr. Appl. Math. (SIAM) J. Appl. Math. **29**, 481 (1975).
- [147] R.E. Meyer, *Quasiclassical scattering above barriers in one dimension*, J. Math. Phys. **17**, 1039 (1976).
- [148] F.H. Stillinger und D.R. Herrick, *Bound states in the continuum*, Phys. Rev. A **11**, 446 (1975); N. Meyer-Vernet, *Strange bound states in the Schrödinger wave equation: When usual tunneling does not occur*, Am. J. Phys. **50**, 354 (1982); F. Capasso, C. Sirtori, J. Faist, D.L. Sivico, S.-G. G. Chu und A. Y. Cho, *Observation of an electronic bound state above a potential well*, Nature **358**, 565 (1992).
- [149] A.B. Migdal, *Qualitative Methods in Quantum Theory*, Reading, 1977; ISBN 0-8053-7064-1.
- [150] R.L. Monaco und E. Capelas de Oliveira, *A new approach for the Jeffreys-Wentzel-Kramers-Brillouin theory*, J. Math. Phys. **35**, 6371 (1994).
- [151] M.J. Moritz, *Semiklassische Beschreibung der Streuung an einer endlichen repulsiven Kreisscheibe*, Diplomarbeit, TU München (1995).
- [152] M.J. Moritz, *Klassisch verbotene Transmission*, Verh. der Dtsch. Phys. Ges. **34**, 251 (1999).
- [153] M.J. Moritz, *Tunneling and reflection of long waves*, Phys. Rev. A **60**, 832 (1999).
- [154] M.J. Moritz, C. Eltschka und H. Friedrich, *Threshold properties of attractive and repulsive $\pm 1/r^2$ potentials*, zur Veröffentlichung Phys. Rev. A angenommen.
- [155] M.J. Moritz und H. Friedrich, *Scattering by a Coulomb field in two dimensions*, Am. J. Phys. **66**, 274 (1998).

- [156] P.M. Morse und H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, New York and Toronto, 1953.
- [157] A. Mostafazadeh, *Exact semiclassical evolutions in relativistic and non-relativistic scalar quantum mechanics and quantum cosmology*, Nuclear Physics B **509**, 529 (1998).
- [158] K.F. Niessen, *Über die annähernden komplexen Lösungen für den harmonischen Oszillator*, Annalen der Physik, Band **85**, 497 (1928).
- [159] L. Nordheim, *Zur Theorie der thermischen Emission und der Reflexion von Elektronen an Metallen*, ZS. f. Phys. **46**, 833 (1928).
- [160] F.W.J. Olver, *Asymptotics and special functions*, New York, 1974; ISBN 0-12-525850.
- [161] T.F. O'Malley, L. Spruch und L. Rosenberg, *Modification of Effective-Range Theory in the Presence of a Long-Range (r^{-4}) Potential*, J. Math. Phys. **2**, 491 (1961).
- [162] R. Omnès, *Consistent interpretations of quantum mechanics*, Rev. Mod. Phys. **64**, 339 (1992).
- [163] E. Papp, *Quasi-Classical $1/N$ Energy Formulae for the Superposition between the Attractive Potential $-\lambda_0/x^2$ and the Repulsive ($n > 2$)-Potential $\gamma(n)/x^n$* , Europhys. Lett. **9**, 309 (1989).
- [164] C.S. Park, M.G. Jeong, S.-K. Yoo und D.K. Park, *Double-well potential: The WKB approximation with phase loss and anharmonicity effect*, Phys. Rev. A **58**, 3443 (1998).
- [165] D. Park, *Classical Dynamics and Its Quantum Analogues*, Berlin, 1990; ISBN 3-540-51398-1.
- [166] S.H. Patil, *Perturbative approach in the WKB analysis: Application to the Stark effect*, Phys. Rev. A **59**, 2684 (1999).
- [167] S.H. Patil, *Scattering amplitudes and bound state energies for one-dimensional, weak potentials*, Am. J. Phys. **67**, 616 (1999).
- [168] W. Pauli, *Die allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik*, in: Handbuch der Physik (Hrsg.: S. Flügge), Band V, Teil 1, Berlin, Göttingen, Heidelberg, 1958.
- [169] R. Paulsson, F. Karlsson und R.J. Le Roy, *Reliability of high-order phase-integral eigenvalues for single and double minimum potentials*, J. Chem. Phys. **79**, 4346 (1983).

- [170] G. Peach, *The evaluation of phaseshifts at very low energies*, J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. **12**, L13 (1979).
- [171] V.S. Popov, V.D. Mur und A.V. Sergeev, *Quantization rules for quasistationary states*, Phys. Lett. A **157**, 185 (1991).
- [172] L.P. Presnyakov, *Phase-shift equations in the scattering theory of particles and waves*, Phys. Rev. A **44**, 5636 (1991).
- [173] T. Purr and H. Friedrich, *Mixing of LS configuration in terminating dipole series of H^-* , Phys. Rev. A **57**, 4279 (1998).
- [174] T. Purr, H. Friedrich und A. Stelbovics, *Truncated dipole series in the electron-hydrogen and positron-hydrogen systems*, Phys. Rev. A **57**, 308 (1998).
- [175] K. Riisager, D.V. Fedorov und A.S. Jensen, *Quantum halos*, Europhys. Lett. **49**, 547 (2000).
- [176] R.W. Robinett, *WKB energy quantization and first-order perturbation theory*, Am. J. Phys. **65**, 320 (1997).
- [177] M. Robnik und L. Salasnich, *WKB to all orders and the accuracy of the semiclassical quantization*, J. Phys. A: Math. Gen. **30**, 1711 (1997).
- [178] M. Robnik, L. Salasnich und M. Vranicar, *High Order WKB Prediction of the Energy Splitting in the Symmetric Double Well Potential*, Progress of Theoretical Physics Supplement No. 139, 550 (2000).
- [179] M. Roncadelli, *Classical dynamical origin of Feynman paths?* J. Phys. A: Math. Gen. **26**, L949 (1993).
- [180] L. Rosenberg, *Effect of long-range interactions on low-energy scattering parameters: Variational formulation*, Phys. Rev. A **55**, 2857 (1997).
- [181] M.G. Rozman, P. Reineker und R. Tehver, *One-dimensional scattering: Recurrence relations and differential equations for transmission and reflection amplitudes*, Phys. Rev. A **49**, 3310 (1994).
- [182] H.R. Sadeghpour, J.L. Bohn, M.J. Cavagnero, B.D. Esry, I.I. Fabrikant, J.H. Macek und A.R.P. Rau, Topical Review: *Collisions near threshold in atomic and molecular physics*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **33**, R93 (2000).
- [183] V. Sanchez-Villicana, S.D. Gensemer und P.L. Gould, *Observations of flux enhancement in collisions between ultracold atoms*, Phys. Rev. A **54**, R3730 (1996).
- [184] L. Schiff, *Quantum Mechanics*, New York, 1968;

- [185] E. Schmutzer, *Grundlagen der Theoretischen Physik, Teil I*, Mannheim, 1989; ISBN 3-411-03145-X.
- [186] E. Schmutzer, *Grundlagen der Theoretischen Physik, Teil II*, Mannheim, 1989; ISBN 3-411-03146-8.
- [187] M. Schubert und G. Weber, *Quantentheorie*, Heidelberg, 1993; ISBN 3-86025-015-9.
- [188] F. Schwabl, *Quantenmechanik*, Berlin, 1993; ISBN 3-540-56812-3.
- [189] B. Segev, R. Côté und M.G. Raizen, *Quantum reflection from an atomic mirror*, Phys. Rev. A. **56**, R3350 (1997) und *Retardation effects on quantum reflection from an evanescent-wave atomic mirror*, Phys. Rev. A **58**, 3999 (1998).
- [190] M. Selg, *Quasi-discrete features of the continuous energy spectrum: an application to metastable Xe^* -Xe pairs*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **29**, 699 (1996). R.A. Turner, L.M. Raff und D.L. Thompson, *Theoretical studies of tunneling processes in three-body exchange reactions of van der Waals rare gas dimers*, J. Chem. Phys. **80**, 3189 (1984); E.E. Ferguson, C.R. Albertoni, R. Kuhm, Z.Y. Chen, R.G. Keesee und A.W. Castleman, Jr., *The role of rotational tunneling in the metastable decay of rare gas cluster ions*, J. Chem. Phys. **88**, 6335 (1988);
- [191] R. Shakeshaft, *Low energy scattering by the r^{-3} potential*, J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. **5**, L115 (1972).
- [192] E.Y. Sidky und I. Ben-Itzhak, *Phase-amplitude-method for calculating resonance energies and widths for one-dimensional potentials*, Phys. Rev. A **60**, 3586 (1999).
- [193] R.M. Spector, *Exact Solution of the Schrödinger Equation for Inverse Fourth-Power Potential*, J. Math. Phys. **5**, 1185 (1964).
- [194] K. Sohlberg, R.E. Tuzun, B.G. Sumpter und D.W. Noid, *Application of rigid-body dynamics and semiclassical mechanics to molecular bearings*, Nanotechnology **8**, 103 (1997).
- [195] A. Sommerfeld, *Das Plancksche Wirkungsquantum und seine allgemeine Bedeutung für die Molekülphysik*, Phys. ZS. **12**, 1057 (1911).
- [196] A. Sommerfeld und H. Bethe, *Elektronentheorie der Metalle*, Berlin, Heidelberg, New York, 1967.
- [197] U. Sukhatme und A. Pagnamenta, *Finite eigenfunctions in the WKB approximation*, Am. J. Phys. **59**, 944 (1991).

- [198] R. Szmytkowski, *Analytical calculations of scattering lengths in atomic physics*, J. Phys. A: Math. Gen. **28**, 7333 (1995).
- [199] K. Takahashi, *Wigner and Husimi Functions in Quantum Mechanics*, J. Phys. Soc. Japan **55**, 762 (1986); K. Takahashi und N. Saitô, *Chaos and Husimi Distribution Function in Quantum Mechanics*, Phys. Rev. Lett. **55**, 645 (1985); X.-G. Hu und Q.-S. Li, *Morse oscillator in a quantum phase-space representation: rigorous solutions*, J. Phys. A: Math. Gen. **32**, 139 (1999).
- [200] J. Trost, *Nicht-ganzzahlige Maslov-Indizes*, Thun und Frankfurt/Main, 1997; ISBN 3-8171-1543-1.
- [201] J. Trost, C. Eltschka und H. Friedrich, *Quantization in molecular potentials*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **31**, 361 (1998).
- [202] J. Trost und H. Friedrich, *WKB and exact wave functions for inverse power-law potentials*, Phys. Lett. A **228**, 127 (1997).
- [203] Y.P. Varshni, *Semi-Classical Approximations for the Energy Levels of a Two-Term Inverse Power Potential*, Europhys. Lett. **20**, 295 (1992).
- [204] F. Verhulst, *Nonlinear Differential Equations and Dynamical Systems*, Berlin 1996; ISBN 3-540-60934-2.
- [205] E. Vogt und G.H. Wannier, *Scattering of Ions by Polarization Forces*, Phys. Rev. **95**, 1190 (1954).
- [206] Z. Wang und B. Li, *Geometric Phase in Path Integral and Quantisation Rule*, Chin. Phys. Lett. **16**, 241 (1999).
- [207] J. Weiner, V.S. Bagnato, S. Zilio und P.S. Julienne, *Experiments and theory in cold and ultracold collisions*, Rev. Mod. Phys. **71**, 1 (1999).
- [208] R.F. Werner und W.P.H. Wolff, *Classical Mechanics as quantum mechanics with infinitesimal \hbar* , Phys. Lett. A **202**, 155 (1995).
- [209] K.J. Whiteman, *Invariants and stability in classical mechanics*, Rep. Prog. Phys. **40**, 1033 (1977).
- [210] B. Yurke, *Quantizing the damped harmonic oscillator*, Am. J. Phys. **54**, 1133 (1986); A.L. de Brito, F.C. Carvalho, B. Baseia und H. Dias *The quantum damped oscillator revisited*, Il Nouv. Cim. **113B**, 415 (1998); B. Vestergaard und J. Javanainen, *Semiclassical analysis of the metastable driven and damped quantized anharmonic oscillator*, Phys. Rev. A **58**, 1537 (1998); C. Degli Esposti, L. Ferrari und H.R. Lewis, *Reduction method for the linear quantum or classical oscillator with time-dependent frequency, damping, and driving*, Phys. Rev. A

- 61**, 010101(R) (1999); D. Cohen, *Quantum dissipation due to the Interaction with Chaotic Degrees of Freedom and the Correspondence Principle*, Phys. Rev. Lett. **82**, 4951 (1999) und R.J. Wysocki, *Quantum equations of motion for a dissipative system*, Phys. Rev. A **61**, 022104 (2000).
- [211] J. Zamastil, J. Cizek und L. Skála, *WKB Approach to Calculating the Lifetime of Quasistationary states*, Phys. Rev. Lett. **84**, 5683 (2000).
- [212] N.I. Zhirnov, *The Probability of Potential Barrier Penetration in the Generalized WKB Approximation*, Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Fiz. **6**, 101 (1966) [Sov. Phys. J. **9**, 56 (1966)] und Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Fiz. **6**, 108 (1966) [Sov. Phys. J. **9**, 61 (1966)].
- [213] D. Zor und K.G. Kay, *Globally Uniform Semiclassical Expressions for Time-Independent Wave Functions*, Phys. Rev. Lett. **76**, 1990 (1996).