

---

# Untersuchungen zum quantenmechanischen Meßprozeß

---

Diplomarbeit

Carsten Hartmann  
Fachbereich Physik

Oktober 1999





Untersuchungen zum  
quantenmechanischen Meßprozeß:

*Zur WKB-Näherung der  
Schrödinger-Newton Gleichung*

Diplomarbeit

Carsten Hartmann  
Fachbereich Physik



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Schrödinger-Newton-Gleichung</b>	<b>5</b>
2.1	Skalierungsinvarianz der Eigenfunktion . . . . .	7
2.2	Analytische Eigenschaften der Lösungen . . . . .	8
2.3	Asymptotisches Verhalten der Lösungen . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Numerische Behandlung</b>	<b>12</b>
3.1	Regularisierung der SNG . . . . .	13
3.2	Numerische Integration . . . . .	15
3.2.1	Grundzustand . . . . .	16
3.2.2	Höhere gebundene Zustände . . . . .	18
3.2.3	Genauigkeit des Verfahrens . . . . .	19
<b>4</b>	<b>WKB-Näherung der SNG</b>	<b>23</b>
4.1	WKB-Verfahren . . . . .	23
4.1.1	WKB-Näherung in der Nähe der Umkehrpunkte . . . . .	25
4.1.2	Gültigkeitsbereich der WKB-Näherung . . . . .	28
<b>5</b>	<b>Die WKB-Gleichung</b>	<b>30</b>
5.1	Klassisch erlaubtes Gebiet . . . . .	31
5.2	Klassisch verbotenes Gebiet . . . . .	34
5.3	WKB-Lösung . . . . .	36
<b>6</b>	<b>Asymptotik der Eigenwerte</b>	<b>43</b>
6.1	Quantisierungsregel . . . . .	43
6.2	Skalierungsverhalten des Phasenintegrals . . . . .	45
6.3	Skalierungsverhalten der Eigenwerte . . . . .	46
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>48</b>
<b>A</b>	<b>Tabelle der Eigenwerte</b>	<b>50</b>

<i>INHALTSVERZEICHNIS</i>	2
<b>B Integrale des WKB-Potentials</b>	<b>51</b>
B.1 Klassisch erlaubtes Gebiet . . . . .	51
B.2 Klassisch verbotenes Gebiet . . . . .	52
<b>Literatur</b>	<b>57</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

Die moderne Physik fußt auf zwei grundlegenden Theorien: Quantenmechanik und Relativitätstheorie. Die Quantenmechanik ist vermutlich die erfolgreichste physikalische Theorie dieses Jahrhunderts. Dennoch führt sie in ihrer orthodoxen Interpretation (Kopenhagener Deutung) zu konzeptionellen Problemen und Paradoxien, die mittlerweile seit über 60 Jahren sowohl Philosophen als auch Physiker beschäftigen.<sup>1</sup>

Die Kopenhagener Deutung läßt die Quantenmechanik semantisch unvollständig: Das fundamentale Konzept des quantenmechanischen Meßprozesses wird von ihr nur unzureichend gelöst. Das *Meßproblem der Quantenmechanik* besteht, grob gesprochen, im Widerspruch zwischen unitärer Zeitentwicklung gemäß der linearen Schrödingergleichung und dem *Projektionspostulat*, das die Reduktion der Wellenfunktion beschreibt. Solange keine Messung stattfindet, ist die Zeitentwicklung eines Zustandes  $|\Psi\rangle$  vollständig durch die Schrödinger-Gleichung determiniert [47]. Im Falle einer Messung dagegen wird  $|\Psi\rangle$  instantan auf einen Eigenzustand  $|\psi_k\rangle$  der gemessenen Observable  $O$  reduziert.

Nach gängigem Verständnis "verursacht" die Messung von  $O$  die Reduktion oder den Kollaps der Wellenfunktion [14, 45]. Als bloßes Postulat ist dies jedoch unbefriedigend; schlimmstenfalls kaschiert es eine Inkonsistenz in der Theorie. Versteht man die Zustandsreduktion dagegen nicht als rein formale Manipulation des quantenmechanischen Begriffsapparates, so stellt sich die Frage nach der physikalischen Natur dieses Vorgangs.

Bereits zu Beginn der 50er Jahre versuchten Bohm und de Broglie, durch nicht-lineare Modifikationen der gewöhnlichen Schrödinger-Gleichung Reduktionsmechanismen in den quantenmechanischen Formalismus zu integrieren [7, 8]. Ist die

---

<sup>1</sup>Das populärste Paradoxon ist die Burleske von *Schrödingers Katze*, die Schrödinger 1935 in die Diskussion um die Unvollständigkeit der Quantenmechanik einbrachte [43]. Im gleichen Jahr veröffentlichten auch Einstein, Podolsky und Rosen ihr EPR-Gedankenexperiment [1]. Wigner entwickelte schließlich Schrödingers Katzen-Paradoxon weiter, indem er den Superpositionszustand der "lebendig-toten" Katze auf den Beobachter (*Wigners Freund*) ausdehnte und damit den Beobachtungsvorgang zum unendlichen Regreß werden ließ.

Schrödinger-Gleichung nicht-linear, ist eine Superposition stationärer Zustände im allgemeinen nicht mehr stationär. Das schließt beispielsweise offensichtlich unsinnige Superpositionen von lebendigen und toten Katzen, wie sie in Schrödingers Katzen-Paradoxon vorkommen, aus. Die Schwäche dieser Ansätze liegt in ihrem rein formalen Charakter. Statt dessen vertraten Diósi, Pearle, Ghirardi, Rimini, Weber, Károlyházy und Penrose die Auffassung, daß sich die Standard-Quantenmechanik auf eine noch zu entwickelnde, umfassendere Theorie reduzieren lassen müsse. Die Arbeiten [9]-[13], [18, 23, 16] sowie [35]-[39] geben einen kurzen Einblick in die Entwicklung der letzten 35 Jahre.<sup>2</sup> Danach sind idealerweise sowohl unitäre Zeitentwicklung als auch Projektionspostulat Grenzfälle eines allgemeinen, physikalischen Zeitentwicklungsmechanismus.

Die reduzierende Theorie muß gerade in den Fällen anwendbar sein, in denen die heutige Quantenmechanik versagt: im Bereich makroskopischer Objekte. Dabei geht es nicht in erster Linie um großskalige Objekte, sondern vielmehr um Teilchen, deren Masse im Bereich "großer" Gegenstände liegt (Cluster schwerer Atome oder Moleküle). Das läßt vermuten, daß die Zeitentwicklung schwerer Teilchen wesentlich durch Gravitation beeinflusst ist.

Die oben genannten Ansätze stehen nach wie vor in der aktuellen Diskussion, insbesondere bei Diósi, Ghirardi et al. und Penrose [13, 18, 38]. Deren Schwierigkeit liegt jedoch darin, daß sie mathematisch außerordentlich schwer zu handhaben sind, da bislang kein adäquater Formalismus für eine quantisierte bzw. semi-quantisierte Raum-Zeit existiert. Ein alternativer Ansatz, der in der vorliegenden Arbeit untersucht wird, ist unter dem Namen *Schrödinger-Newton-Gleichung* bekannt [19, 20, 39, 42]. Neben der numerischen Behandlung der *Schrödinger-Newton-Gleichung* wird eine quasi-klassische Näherung (WKB-Näherung) entwickelt, anhand derer asymptotische Eigenschaften der ursprünglichen Gleichung im Bereich großer Quantenzahlen untersucht werden können.

---

<sup>2</sup>Nebenbei wurden auf der Basis diverser algebraischer Lösungsansätze alternative Formulierungen des Meßprozesses entwickelt, die *Superauswahlregeln* für die Superpositionen makroskopischer Zustände beinhalten [34].



# Kapitel 2

## Schrödinger-Newton-Gleichung

In der Mechanik werden gewöhnlich gravitativ miteinander wechselwirkende Objekte durch Newtons Gravitationstheorie beschrieben. Daher erscheint es intuitiv naheliegend, als Alternative zum üblichen semi-quantisierten Ansatz, die Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen durch ein klassisches Gravitationspotential zu approximieren [42]. Das führt, einer Idee von Penrose folgend, auf die nicht-lineare *Schrödinger-Newton-Gleichung* – genau genommen, auf ein gekoppeltes System von zwei nicht-linearen Differentialgleichungen. Im Unterschied zur linearen Schrödinger-Gleichung ist wegen der Nicht-Linearität der Gleichung eine Superposition stationärer Zustände im allgemeinen nicht stationär. Vielmehr ist zu erwarten, daß eine Superposition

$$|\Psi\rangle = \lambda |\psi_1\rangle + \mu |\psi_2\rangle \quad \text{mit} \quad |\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1 \quad (2.1)$$

nach einer endlichen Lebensdauer  $T$  in einen der beiden (normierten) stationären Zustände  $|\psi_k\rangle$  zerfällt. Die Koeffizienten  $\lambda$  und  $\mu$  geben dabei die relativen Wahrscheinlichkeiten der Zustände  $|\psi_k\rangle$  an. In Übereinstimmung mit der Heisenbergschen Unschärferelation schlug Penrose in [38] die Abschätzung

$$T \approx \frac{\hbar}{E_{grav}} \quad (2.2)$$

vor. Dabei ist  $E_{grav}$  die Eigengravitations-Energie des superponierten Zustandes  $|\Psi\rangle$ , die durch den Ausdruck

$$E_{grav} = -4\pi Gm^2 \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\Psi(r')|^2 |\Psi(r)|^2}{||r - r'||} d^3r' \quad (2.3)$$

gegeben ist, wobei  $m$  die Masse des Teilchens mit der Wellenfunktion  $\Psi$  ist. Sind  $|\psi_1\rangle$  und  $|\psi_2\rangle$  entartete Eigenzustände zum Eigenwert  $E$  und ist  $\lambda \approx \mu$ , kann  $E_{grav}$  näherungsweise mit der Energie-Unschärfe von  $|\Psi\rangle$  identifiziert werden, was die obige Abschätzung für  $T$  rechtfertigt [39]. Die Abschätzung läßt erkennen, warum

Superpositionen makroskopischer Zustände nicht stabil sind und zerfallen (*Eigenreduktion*). Hingegen ist die Lebensdauer mikroskopischer (quantenmechanischer) Superpositionenzustände so groß, daß die Eigenreduktion praktisch keine Rolle spielt.<sup>1</sup>

Es bezeichne nun  $|\psi\rangle$  einen beliebigen Zustand. Die *Schrödinger-Newton-Gleichung* (SNG) beschreibt ein Teilchen der Masse  $m$ , das sich in seinem eigenen Gravitationspotential bewegt. Sie hat die allgemeine Form

$$\Delta\psi = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - \phi)\psi, \quad (2.4)$$

$$\Delta\phi = -4\pi Gm^2|\psi|^2. \quad (2.5)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi|^2$  des Teilchens, multipliziert mit  $m$ , wird hier als seine Massendichte  $\rho$  interpretiert. Dafür nimmt man an, daß im klassischen Grenzfall eine eindeutige Raum-Zeit für den Zustand  $|\psi\rangle$  existiert. Die Bezeichnung *Schrödinger-Newton-Gleichung* trägt dem Eigengravitationsterm (2.5) Rechnung und wurde von Penrose in [39] eingeführt.

Für den Fall, daß der Hamilton-Operator  $H$  nicht-linear ist, existiert kein Spektraltheorem, das analog dem linearen Fall die allgemeine Zeitentwicklung  $e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$  beschreibt. Ist  $\psi$  Lösung von (2.4) und (2.5), so löst dennoch

$$\psi_t = \mathcal{U}(t)\psi = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi \quad (2.6)$$

die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_t = H\psi_t = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \phi\right)\psi_t. \quad (2.7)$$

Da die Greensfunktion des Laplace-Operators bekannt ist, kann die Lösung von (2.5) formal angegeben werden. Es ist

$$\phi(r) = -Gm^2 \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(r')|^2}{||r - r'||} d^3r'. \quad (2.8)$$

Man sieht somit leicht, daß  $H$  mit dem Zeitentwicklungsoperator  $\mathcal{U}$  vertauscht, woraus unmittelbar obige Behauptung folgt. Mit dem gleichen Argument wird gezeigt, daß  $\psi$  ohne Beschränkung der Allgemeinheit reell gewählt werden kann. Um eine einfachere Form der *Schrödinger-Newton-Gleichung* zu erhalten, definiert man

$$U := \frac{2m}{\hbar^2}(E - \phi) \quad \text{und} \quad S := \frac{\psi}{\sqrt{\frac{8\pi Gm^3}{\hbar^2}}}. \quad (2.9)$$

---

<sup>1</sup>Ein konkretes physikalisches Modell für die Zustandsreduktion wurde in [42] vorgeschlagen. Der Zerfall des Superpositions-Zustandes  $|\Psi\rangle$  in einen der Eigenzustände  $|\psi_k\rangle$  geschieht dort unter Abstrahlung von Gravitonen. Die daraus berechneten Zerfallszeiten für makroskopische Superpositionen liegen in einem realistischen Bereich.

Damit erhält man die modifizierte SNG als das folgende System von Differentialgleichungen in  $S$  und  $U$

$$\Delta S = -S U , \quad (2.10)$$

$$\Delta U = -S^2 . \quad (2.11)$$

## 2.1 Skalierungsinvarianz der Eigenfunktion

Da der Hamilton-Operator nicht-linear ist, ist ein Vielfaches einer Eigenfunktion  $S$  im allgemeinen keine Eigenfunktion mehr. Aus diesem Grund kann eine nicht-normierte Funktion  $S$  mit Normquadrat

$$I := \int_{\mathbb{R}^3} S(r)^2 d^3r \quad (2.12)$$

nicht einfach mittels Division durch  $\sqrt{I}$  normiert werden – vorausgesetzt das Normierungsintegral existiert. In unserem speziellen Fall kann jedoch aus den Skalierungseigenschaften der SNG eine normierte Eigenfunktion  $\tilde{S}$  gewonnen werden. Man betrachte dazu eine 2-parametrische Gruppe von Skalierungstransformationen  $\Gamma(\lambda, \mu)$ , die durch

$$\tilde{S}(r) = (\Gamma(\lambda, \mu) \circ S)(r) = \lambda S(\mu r) , \quad \lambda, \mu \in \mathbb{R}_{>0} \quad (2.13)$$

gegeben ist. Das modifizierte Potential  $U$  ist proportional zu  $E - \phi$ , das heißt,  $U$  skaliert sich wie  $\phi$ . Anwendung der Kettenregel und Einsetzen von (2.13) in den Ausdruck (2.8) führen auf

$$\Delta \tilde{S}(r) = \lambda \mu^2 \Delta S(\mu r) , \quad (2.14)$$

$$\tilde{U}(r) = \lambda^2 \mu^{-2} U(\mu r) . \quad (2.15)$$

Es seien nun  $S$  und  $U$  Lösungen der modifizierten SNG. Vergleich der letzten beiden Gleichungen mit (2.10) ergibt, daß  $\tilde{S}$  und  $\tilde{U}$  genau dann auch Eigenlösungen sind, wenn gleichzeitig

$$\lambda \mu^2 \Delta S(\mu r) = -\lambda^2 S(\mu r) U(\mu r) \quad \text{und} \quad (2.16)$$

$$\Delta S(\mu r) = -S(\mu r) U(\mu r) \quad (2.17)$$

erfüllt sind. Dies ist genau dann der Fall, wenn  $\lambda \mu^{-2} = 1$  ist und man erhält eine Skalierungsinvarianz bezüglich

$$\Gamma : \{S, U, r\} \mapsto \{\mu^2 S, \mu^2 U, \mu^{-1} r\} . \quad (2.18)$$

Das Normierungsintegral (2.12) verhält sich demzufolge unter der Skalierung  $\Gamma(\mu^2, \mu)$  wie

$$\tilde{I} = \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{S}(r)^2 d^3r = \lambda^2 \mu^{-3} \int_{\mathbb{R}^3} S(\rho)^2 d^3\rho = \mu I \quad \text{mit} \quad \rho = \mu r . \quad (2.19)$$

Um eine normierte Eigenfunktion  $\tilde{S}$  zu erhalten, wählt man nun einfach  $\mu = I^{-1}$ . Der Eigenwert  $E$  skaliert sich wie  $\phi$  bzw.  $U$ , also gemäß

$$\tilde{E} = \mu^2 E = I^{-2} E . \quad (2.20)$$

## 2.2 Analytische Eigenschaften der Lösungen

Die hier betrachtete Lösungsmenge der SNG sei auf die rotationssymmetrischen Eigenlösungen eingeschränkt. Unter dieser Voraussetzung ist

$$\Delta = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} . \quad (2.21)$$

Das führt auf ein (gekoppeltes) System von nicht-linearen, gewöhnlichen Differentialgleichungen, das wie folgt umgeschrieben werden kann:

$$\Delta S = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} \{rS\} = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left\{ r^2 \frac{dS}{dr} \right\} = -S U , \quad (2.22)$$

$$\Delta U = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} \{rU\} = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left\{ r^2 \frac{dU}{dr} \right\} = -S^2 . \quad (2.23)$$

Neben den trivialen Lösungen  $S \equiv 0$  und  $U \equiv \text{const.}$  gibt es zwei partikuläre Lösungen  $S = \pm 2r^{-2}$  und  $U = 2r^{-2}$ , die am Ursprung  $r = 0$  divergieren. Vom physikalischen Standpunkt aus sind nun gerade diejenigen Lösungen interessant, die im gesamten Definitionsbereich  $D = \mathbb{R}_{\geq 0}$  stetig sind und deren Normierungsintegral (2.12) endlich ist.

Tod und Moroz haben in [19] mit einer Modifikation des Existenz- und Eindeutigkeitssatzes von Picard-Lindelöf bewiesen, daß es eine Klasse von normierbaren Lösungen der SNG gibt, die allesamt auf ganz  $D$  stetig sind und von den Anfangsbedingungen abhängen (gebundene Zustände). In dieser Klasse gibt es eine eindeutige Lösung mit minimalem Eigenwert  $E_1$  (Grundzustand). Die höheren gebundenen Zustände können derart numeriert werden, daß der  $n$ -te Zustand gerade  $n - 1$  Nullstellen hat (*Knotensatz*). Die zugehörigen Energieeigenwerte  $E_n$  streben mit steigendem  $n$  streng monoton gegen Null.

Die Existenz und Eindeutigkeit des Grundzustandes wurde bereits 1977 in einer Arbeit von Lieb mit funktionalanalytischen Mitteln bewiesen [27]. Lieb zeigte dabei auch, daß der Grundzustand rotationssymmetrisch ist. Obwohl Tod und Moroz nicht die Eindeutigkeit der höheren gebundenen Zustände bewiesen haben, gibt es zumindest – wie diese Arbeit zeigen wird – numerische Evidenz für die Eindeutigkeit dieser Lösungen. Ähnliche numerische Ergebnisse sind in der Arbeit [20] von Moroz et. al dargestellt.

Damit gewährleistet ist, daß  $S$  und  $U$  am Ursprung stetig differenzierbar sind, ist es nach (2.22) und (2.23) sowohl hinreichend als auch notwendig, daß beide

Ableitungen dort verschwinden.<sup>2</sup> Danach lassen sich nun die beiden Gleichungen (2.22) und (2.23) integrieren:

$$S'(r) = -\frac{1}{r^2} \int_0^r x^2 S(x) U(x) dx , \quad (2.24)$$

$$U'(r) = -\frac{1}{r^2} \int_0^r x^2 S(x)^2 dx . \quad (2.25)$$

Man sieht sofort, daß der Integrand in (2.25) positiv definit ist. Folglich ist  $U(r)$  streng monoton fallend. Durch zweimaliges Integrieren von (2.22) und (2.23) lassen sich  $S$  und  $U$  formal als Integrallösungen angeben. Der erste Schritt führt auf

$$\frac{d}{dx} \{xS(x)\} \Big|_0^r = \frac{d}{dr} \{rS\} - S(0) = - \int_0^r xS(x)U(x) dx , \quad (2.26)$$

$$\frac{d}{dx} \{xU(x)\} \Big|_0^r = \frac{d}{dr} \{rU\} - U(0) = - \int_0^r xS(x)^2 dx . \quad (2.27)$$

Eine weitere Integration von 0 bis  $r$  ergibt

$$xS(x) \Big|_0^r - rS(0) = - \int_0^r \left( \int_0^y xS(x)U(x) dx \right) dy , \quad (2.28)$$

$$xU(x) \Big|_0^r - rU(0) = - \int_0^r \left( \int_0^y xS(x)^2 dx \right) dy . \quad (2.29)$$

Das äußere Integral auf der rechten Seite kann partiell ausgewertet werden. Man erhält als implizite Lösung für  $S$  und  $U$

$$S(r) = S(0) - \int_0^r x \left(1 - \frac{x}{r}\right) S(x)U(x) dx , \quad (2.30)$$

$$U(r) = U(0) - \int_0^r x \left(1 - \frac{x}{r}\right) S(x)^2 dx . \quad (2.31)$$

Es seien nun  $\{S_1, U_1\}$  und  $\{S_2, U_2\}$  zwei verschiedene Lösungen der SNG. Multipliziert man (2.22) mit  $r^2$  und zusätzlich jeweils eine Gleichung mit der Wellenfunktion der anderen, bekommt man

$$S_2 \frac{d}{dr} (r^2 S_1') = -r^2 S_2 S_1 U_1 \quad \text{und} \quad S_1 \frac{d}{dr} (r^2 S_2') = -r^2 S_1 S_2 U_2 . \quad (2.32)$$

Man integriert anschließend beide Gleichungen bezüglich  $r$  von 0 bis Unendlich und zieht sie voneinander ab. Nach partieller Integration der linken Seite bleibt

$$(S_2 r^2 S_1' - S_1 r^2 S_2') \Big|_0^\infty = \int_0^\infty r^2 S_1 S_2 (U_1 - U_2) dr . \quad (2.33)$$

---

<sup>2</sup>Im weiteren bezeichne  $S'(r)$  die Ableitung von  $S$  nach  $r$ ,  $U'(r)$  diejenige von  $U$  nach  $r$  usw..

Unter der Voraussetzung, daß die hier diskutierten Lösungen normierbar seien, das heißt,  $S \in \mathcal{L}^2$  gelte, verschwindet die linke Seite vollständig. Damit ergibt sich folgende Beziehung:

$$\int_0^\infty r^2 S_1 S_2 (U_1 - U_2) dr = 0 . \quad (2.34)$$

Diese Art von Orthogonalitätsrelation ist allerdings keine spezifische Eigenschaft der SNG, da sie generell für zwei beliebige radiale Schrödinger-Gleichungen erfüllt ist. Sie sei daher auch nur der Vollständigkeit halber erwähnt.

## 2.3 Asymptotisches Verhalten der Lösungen

Mit Hilfe der Integralgleichungen (2.24) bis (2.29) läßt sich leicht das asymptotische Verhalten der Lösungen in der Nähe von Null sowie für große Werte von  $r$  angeben. Um das Verhalten in der Umgebung der Ursprungs abzuschätzen, werden die Integrale (2.28) und (2.29) einige Male iteriert. Die Iterationsvorschrift lautet

$$S_{n+1}(r) = S(0) - \int_0^r x \left(1 - \frac{x}{r}\right) S_n(x) U_n(x) dx , \quad (2.35)$$

$$U_{n+1}(r) = U(0) - \int_0^r x \left(1 - \frac{x}{r}\right) S_n(x)^2 dx . \quad (2.36)$$

Wählt man als Startpunkt der Iteration  $S_0 = S(0)$  und  $U_0 = U(0)$ , bekommt man bereits nach zwei Iterationsschritten

$$S(r) = S_0 - \frac{S_0 U_0}{6} r^2 + \frac{S_0^3 + S_0 U_0^2}{120} r^4 + \mathcal{O}(r^6) , \quad (2.37)$$

$$U(r) = U_0 - \frac{S_0^2}{6} r^2 + \frac{S_0^2 U_0}{60} r^4 + \mathcal{O}(r^6) . \quad (2.38)$$

Dadurch findet man schließlich die Reihenentwicklungen von  $S$  und  $U$  in der Nähe des Ursprungs.

$$S(r) = \sum_i s_i r^{2i} \quad \text{und} \quad U(r) = \sum_i u_i r^{2i} . \quad (2.39)$$

Es läßt sich problemlos zeigen, daß es eine offene Umgebung um Null gibt, in der die Reihe konvergiert, die Lösungen also analytisch sind. Der Konvergenzradius hängt dabei, wie Tod und Moroz in [19] gezeigt haben, von den Anfangswerten  $S_0$  und  $U_0$  ab. Beginnt man die Iteration mit  $S_0 = 0$ , so folgt wegen der Eindeutigkeit der Lösung bzw. aus (2.35), daß  $S \equiv 0$  ist, womit unmittelbar klar ist, daß keine ungeraden Lösungen der SNG existieren. Da die SNG zudem, wie man sich leicht klarmacht, invariant unter

$$\{S(r), U(r)\} \mapsto \{-S(r), U(r)\} \quad (2.40)$$

ist, kann  $S_0$  ohne weiteres positiv gewählt werden. Man nehme nun an, daß  $U_0$  negativ sei. Anhand von Gleichung (2.24) erkennt man, daß dann  $S'(r)$  positiv ist, weil  $U'(r)$  stets kleiner Null ist. Folglich muß für normierbare Lösungen  $U_0 > 0$  gelten. Um das asymptotische Verhalten für große  $r$  zu bestimmen, wird zunächst (2.31) wie folgt umgeschrieben:

$$U(r) = U(0) - \int_0^r xS(x)^2 dx + \frac{1}{r} \int_0^r x^2 S(x)^2 dx \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A + \frac{B}{r}. \quad (2.41)$$

Man sieht, daß nach der Definition (2.12) der Koeffizient  $B$  mit dem Normierungsintegral  $I$  identisch ist. Da der Integraloperator monoton ist und  $x$  positiv ist, ergibt sich nach dem Dreifolgensatz unmittelbar, daß dann auch das erste Integral für  $r \rightarrow \infty$  konvergiert. Ein Vergleich mit dem Ansatz  $U = 2(E - \phi)$  zeigt, daß  $U$  gerade gegen das Zweifache des Eigenwertes  $E$  konvergiert. Nach (2.20) ist dann der normierte Eigenwert  $\tilde{E}$

$$\tilde{E} = \frac{A}{2I^2} = \frac{A}{2B^2}. \quad (2.42)$$

Das asymptotische Verhalten der Wellenfunktion ergibt sich nun direkt aus der Differentialgleichung (2.22), wobei  $U \equiv A$  als konstant angenommen wird. Mit dem Ansatz  $X(r) = rS(r)$  nimmt die Gleichung die Form

$$\frac{d^2 X(r)}{dr^2} = -X(r)A \quad \text{mit} \quad A = U(0) - \int_0^\infty xS(x)^2 dx \quad (2.43)$$

an. Die allgemeine Lösung dieser Gleichung ist  $X(r) = ke^{\pm i\sqrt{A}r}$ . Für gebundene Zustände als Lösungen müssen oszillierende asymptotische Lösungen ausgeschlossen sein. Das bedeutet,  $A$  ist negativ. Aus dem gleichen Grund kommt nur die exponentiell abfallende Lösung in Frage. Nun läßt sich das asymptotische Verhalten von  $S(r)$  angeben:

$$S(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{k}{r} e^{-\sqrt{|A|}r}. \quad (2.44)$$

Das asymptotische Verhalten von  $S$  und  $U$  am Ursprung ist im weiteren Verlauf für die numerische Integration der SNG von Bedeutung. Zudem wird sich zeigen, daß das Verhalten für große  $r$  gerade mit der WKB-Approximation für  $S$  und  $U$  in Kapitel 5 konsistent ist.

# Kapitel 3

## Numerische Behandlung

Das Spektrum nicht-linearer Operatoren ist im allgemeinen kontinuierlich [5]. Gesucht ist jedoch gerade die Menge diskreter Lösungen, die normierbar und damit physikalisch sinnvoll sind. Die Eigenwerte dieser Lösungen bilden eine diskrete Punktmenge. Um die gebundenen, rotationssymmetrischen Zustände und die zugehörigen Eigenwerte zu berechnen, kann das System gewöhnlicher Differentialgleichungen (2.22) und (2.23) mittels numerischer Standardverfahren integriert werden.

Die Lösungen hängen von den positiven Anfangswerten  $S_0$  und  $U_0$  ab. Aufgrund der Skalierungsfreiheit (2.18) kann nun ohne Beschränkung der Allgemeinheit einer der beiden Anfangswerte – man nehme beispielsweise  $U_0$  – beliebig festgelegt werden, so daß die Lösung nur noch von einem freien Parameter abhängt. Wir setzen  $U_0 = 1$ , womit die Lösungen in der Umgebung des Ursprungs nur noch von  $S_0$  abhängen. Das heißt, die Lösungen werden durch die asymptotischen Formen (2.37) sowie (2.38)

$$S(r) = S_0 - \frac{S_0}{6}r^2 + \frac{S_0(S_0^2 + 1)}{120}r^4 + \mathcal{O}(r^6) , \quad (3.1)$$

$$U(r) = 1 - \frac{S_0^2}{6}r^2 + \frac{S_0^2}{60}r^4 + \mathcal{O}(r^6) . \quad (3.2)$$

vollständig bestimmt. Durch Variation des einzigen freien Parameters  $S_0$  findet man schließlich eine unendliche Menge gebundener Zustände. Die Menge der tatsächlich erhältlichen Lösungen wird jedoch *in praxi* durch die endliche numerische Genauigkeit eingeschränkt. Ferner beschränkt die Genauigkeit des Verfahrens (Diskretisationsfehler) generell die Stabilität der numerischen Lösung. Das bedeutet, daß die Lösung instabil wird und bei einem endlichen Wert  $r_{max}$  divergiert, sobald der Fehler des Anfangswertes mit dem systematischen Diskretisationsfehler des Integrationsverfahrens zu groß wird.



### 3.1 Regularisierung der SNG

Neben dem systematischen Problem der Genauigkeit des Verfahrens erweist sich die  $\frac{1}{r}$ -Singularität des Laplace-Operators in der SNG als problematisch für die numerische Integration: Um die Integration bis in die Nähe des Ursprungs fortzusetzen, muß mit Schrittweiten in der Größenordnung der Systemgenauigkeit gearbeitet werden. Es gibt jedoch einen Trick, um das nicht-autonome System aus (2.22) und (2.23) unter Ausnutzung der Skalierungseigenschaften (2.18) in ein System autonomer Differentialgleichungen zu transformieren. Das Verfahren ist in [4] beschrieben. Hierzu der folgende Satz.

**Satz 1** *Ist die 1-parametrische Symmetriegruppe  $\{g^\mu\}$  eines Richtungsfeldes im  $\mathbb{R}^n$  bekannt, so läßt sich die Integration der entsprechenden Differentialgleichung auf die Integration einer Differentialgleichung im  $\mathbb{R}^{n-1}$  zurückführen (Arnold, 1978).*

Die Idee hinter diesem Verfahren geht auf die Theorie der Transformationsgruppen von Lie zurück [26]. Beweise des obigen Satzes finden sich in beinahe jedem Buch über die Anwendung von Lie-Gruppen auf Differentialgleichungen.

Das System der SNG läßt sich in eine äquivalente Differentialgleichung vierter Ordnung umschreiben. Das zugehörige Richtungsfeld hat die implizite Darstellung

$$\frac{dS}{dr} = F \left( r, S, \frac{d^2S}{dr^2}, \frac{d^3S}{dr^3}, \frac{d^4S}{dr^4} \right) \quad \text{mit } F : \mathbb{R}^5 \mapsto \mathbb{R} . \quad (3.3)$$

Die Symmetrie der Lösungen  $S$ , die durch  $\Gamma(\mu^2, \mu)$  bestimmt ist, bleibt dabei erhalten. Das Richtungsfeld der SNG läßt sich dann unter Ausnutzung der Symmetrieeigenschaften auf den Faktorraum bezüglich der Wirkung von  $\{g^\mu\}$  (*Orbitraum*) abbilden. Abbildung 3.1 illustriert die Vorgehensweise:

Man betrachte das Richtungsfeld (3.3) im Punkt  $s_0 \in \mathbb{R}^5$ , der durch die Bedingung  $r = 1$  festgelegt ist. Es sei  $\mathcal{C} = \{g^\mu s_0\}$  der durch den Punkt  $s_0$  verlaufende Orbit der Symmetriegruppe sowie  $\Omega \subset \mathbb{R}^4$  eine zu  $\mathcal{C}$  lokal transversale Fläche. In der Umgebung von  $s_0$  kann jetzt ein lokales Koordinatensystem  $(\mu, \omega)$  definiert werden, so daß den Koordinaten  $\mu \in \mathbb{R}$  und  $\omega \in \Omega$  der Punkt  $g^\mu \omega$  des ursprünglichen Richtungsfeldes zugeordnet wird.

Es sei nun  $P$  die Projektion des Richtungsfeldes der SNG auf den Orbitraum. Dann ist  $P$  folgendermaßen definiert:

$$P(\mu, \omega) = \omega \in \Omega \quad \text{und} \quad g^{\mu_1}(\mu_2, \omega) = (\mu_1 + \mu_2, \omega) . \quad (3.4)$$

Nun sei mit  $\mu = e^t$  eine Parametrisierung der Gruppe  $\{g^\mu\}$  gegeben. Die neue Transformationsgruppe  $\{g^t\}$  ist danach additiv, das heißt

$$g^{t+t'} = g^t \circ g^{t'} . \quad (3.5)$$

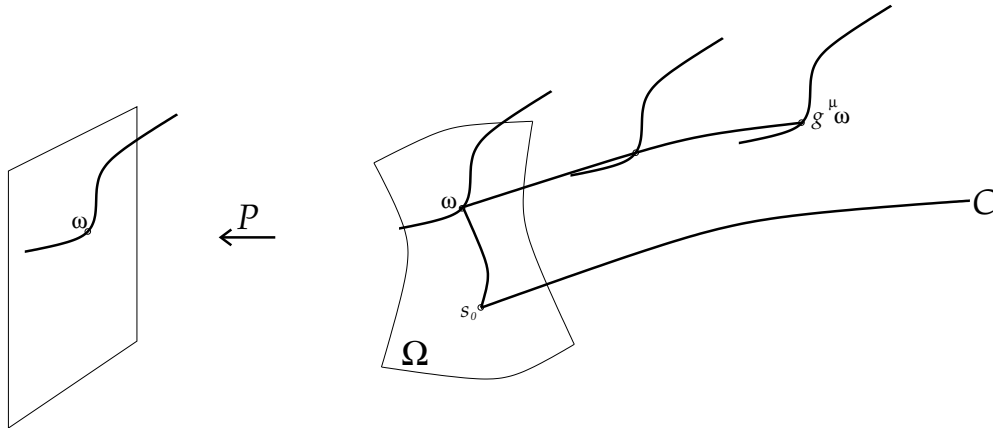


Abbildung 3.1: Projektion des Richtungsfeldes auf den Orbitraum von  $g^\mu$ .

Die transformierte Differentialgleichung wird also invariant unter Translationen  $t \mapsto t+t'$  sein. Damit bietet sich unter Berücksichtigung der Symmetrieeigenschaft (2.18) folgende Transformation an:

$$S(r) \mapsto r^2 S(r) = x(t) , \tag{3.6}$$

$$U(r) \mapsto r^2 U(r) = y(t) \quad \text{mit} \quad r = e^t . \tag{3.7}$$

Differentiation bezüglich  $r$  ergibt nach der Kettenregel

$$S'(r) = \frac{dt}{dr} \frac{d}{dt} \left\{ e^{-2t} x \right\} = e^{-3t} (\dot{x} - 2x) , \tag{3.8}$$

$$U'(r) = \frac{dt}{dr} \frac{d}{dt} \left\{ e^{-2t} y \right\} = e^{-3t} (\dot{y} - 2y) . \tag{3.9}$$

Die punktierten Größen bezeichnen die Ableitung nach einem Parameter – hier nach  $t$ . Nochmaliges Differenzieren führt auf

$$S''(r) = \frac{dt}{dr} \frac{d}{dt} \left\{ e^{-3t} (\dot{x} - 2x) \right\} = e^{-4t} (\ddot{x} - 5\dot{x} + 6x) , \tag{3.10}$$

$$U''(r) = \frac{dt}{dr} \frac{d}{dt} \left\{ e^{-3t} (\dot{y} - 2y) \right\} = e^{-4t} (\ddot{y} - 5\dot{y} + 6y) . \tag{3.11}$$

Setzt man die  $t$ -abhängigen Ausdrücke für die ersten und zweiten Ableitungen in die SNG ein, so erhält man ein autonomes Differentialgleichungs-System:

$$\ddot{x}(t) - 3\dot{x}(t) + (2 + y(t))x(t) = 0 , \tag{3.12}$$

$$\ddot{y}(t) - 3\dot{y}(t) + 2y(t) + x(t)^2 = 0 . \tag{3.13}$$

In der Tat verhält sich das regularisierte System in der Umgebung von  $r = 0$  sowie für große Werte von  $r$  "gutmütiger" als die ursprüngliche SNG; die Lösungskurven

sind glatter und lassen sich näher bis an den Ursprung fortsetzen als die der SNG. Mit dem regularisierten System kann die Integration für kleine Werte von  $r$  bis etwa  $10^{-20}$  getrieben werden, wohingegen mit dem ursprünglichen System die Lösungen nur bis circa  $10^{-7}$  stabil blieben. Zudem divergiert die Lösung in den meisten Fällen erst bei größeren Werten von  $r$ . Abbildung 3.2 zeigt zum Vergleich die Lösungskurven der Wellenfunktionen beider Gleichungen im Bereich des exponentiell abfallenden Bereichs.

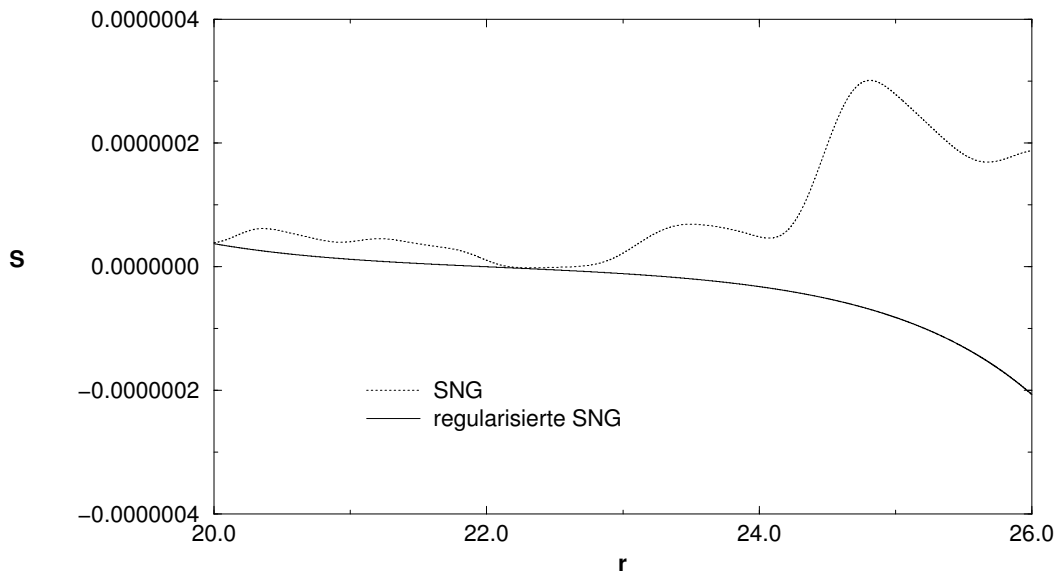


Abbildung 3.2: Vergleich des exponentiell abfallenden Bereiches der Wellenfunktion  $S$  der regularisierten SNG (3.12) und der ursprünglichen Form (2.22).

## 3.2 Numerische Integration

Mit der regularisierten SNG läßt sich die Integration nun problemlos durchführen. Die numerischen Lösungsfunktionen sind hinreichend glatt. Durch die Substitution  $r = e^t$  wird der Wertebereich der alten Variablen  $r \in ]0, \infty[$  injektiv auf den der neuen, unabhängigen Variable  $t \in ]-\infty, \infty[$  abgebildet. Der Algorithmus startet bei betragsmäßig großen, negativen Werten für  $t$  und läuft – analog der numerischen Integration bezüglich  $r$  – bis zu einem  $t_{max}$ , bei dem die Lösung numerisch instabil wird und divergiert.

Die Integration wird mit der Routine `NDSolve` des Programms `MATHEMATICA` durchgeführt [22, 29]. Das Programm verwendet standardmäßig zwei Verfahren: ein Mehrschritt-Verfahren für nicht-steife Differentialgleichungen (Adams-Moulton-Algorithmus mit variabler Ordnung und automatischer Schrittweitenan-

passung) sowie ein Rückwärts-Verfahren für steife Systeme mit stark unterschiedlichem Abklingverhalten der einzelnen Lösungen (Rückwärts-Gear-Methode mit variabler Ordnung).

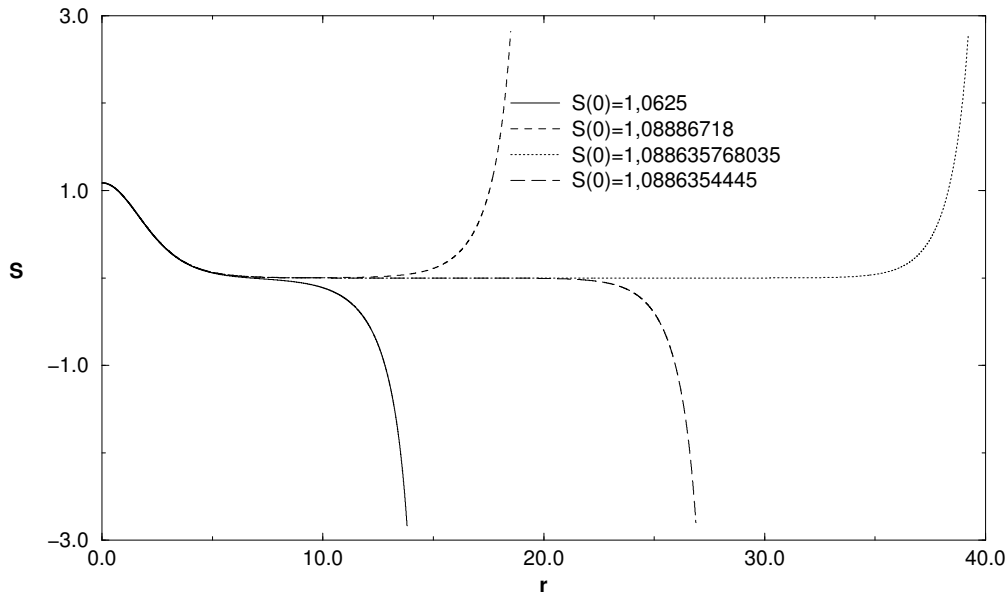


Abbildung 3.3: Abhängigkeit der Lösungen von den Anfangswerten  $\xi_i = S(0)$ .

### 3.2.1 Grundzustand

Durch Variation des einzigen freien, positiven Parameters  $x_0$ , der durch die Transformation (3.6) aus  $S_0$  hervorgeht, findet man die verschiedenen Eigenlösungen der SNG.<sup>1</sup> Der Grundzustand ist der gebundene Zustand ohne Nullstellen. Man startet mit einem beliebigen Anfangswert  $\xi_{i+1} \in M_i = ]a_i, b_i]$ . Das Intervall  $M_i$  muß wenigstens so groß sein, daß der tatsächliche Anfangswert  $S_0$  sicher in  $M_i$  liegt. Man wähle  $a_0 = 0$ ,  $b_0 = 2$  und  $\xi_1 = \frac{a_0 + b_0}{2} = 1$ . Wie zu erwarten ist, divergiert die daraus gewonnene Funktion  $S_i(r)$  bereits bei kleinen Werten für  $r$ ; die Funktion ist nicht normierbar.

Man findet leicht durch Probieren heraus, daß die Anzahl der Nullstellen der berechneten Funktion  $S_i(r)$  davon abhängt, ob  $\xi_i$  kleiner oder größer als  $S_0$  ist: Ist  $\xi_i < S_0$ , hat die Funktion mindestens eine Nullstelle. Ist dagegen  $\xi_i > S_0$ , so hat  $S_i(r)$  keine Nullstelle und divergiert gegen Unendlich. Es sei nun  $N_i$  die Anzahl

<sup>1</sup>Der Anschaulichkeit halber beziehe ich mich im folgenden auf die ursprüngliche Form der SNG mit den Lösungen  $S(r)$  und  $U(r)$ . Die dazugehörigen Anfangswerte  $S_0$  und  $U_0$  können durch die entsprechende Transformation auf die Anfangswerte der regularisierten SNG gebracht werden.

der Nullstellen von  $S_i(r)$ . Dann läßt sich eine Folge  $\{M_i\}$  rekursiv definieren, für die gilt

$$M_{i+1} = ]a_{i+1}, b_{i+1}] = \begin{cases} ]\xi_i, b_i] & \text{falls } N_i > 0 \\ ]a_i, \xi_i] & \text{sonst} \end{cases} . \quad (3.14)$$

Dabei ist  $\xi_i = \frac{a_{i-1} + b_{i-1}}{2}$  der Mittelpunkt des Intervalls  $M_{i-1}$ . Die Folge der  $M_i$  bildet eine Intervallschachtelung, so daß

$$M_0 \supset M_1 \supset M_2 \dots \supset M_n \supset M_{n+1} \dots \supset \{S_0\} . \quad (3.15)$$

Man sieht leicht ein, daß damit die Folge der  $\xi_i$  gegen  $S_0$  konvergiert. Abbildung 3.3 veranschaulicht das Verfahren der Einschachtelung des Anfangswertes  $S_0$  durch die  $M_i$ . Die numerische Approximation des Anfangswertes, die das Verfahren nach einigen Schritten liefert, ist  $S_0 = 1,0886357680344\dots$ ; analog gilt für die Eigenlösung  $\{S_i(r)\} \rightarrow S(r)$ , wobei  $S(r)$  hier der Grundzustand der SNG sei. Simultan findet man durch dieses Verfahren das Potential  $U$  zum Zustand  $S$ . Abbildung 3.4 zeigt das Potential und die nicht-normierte Wellenfunktion des Grundzustandes.

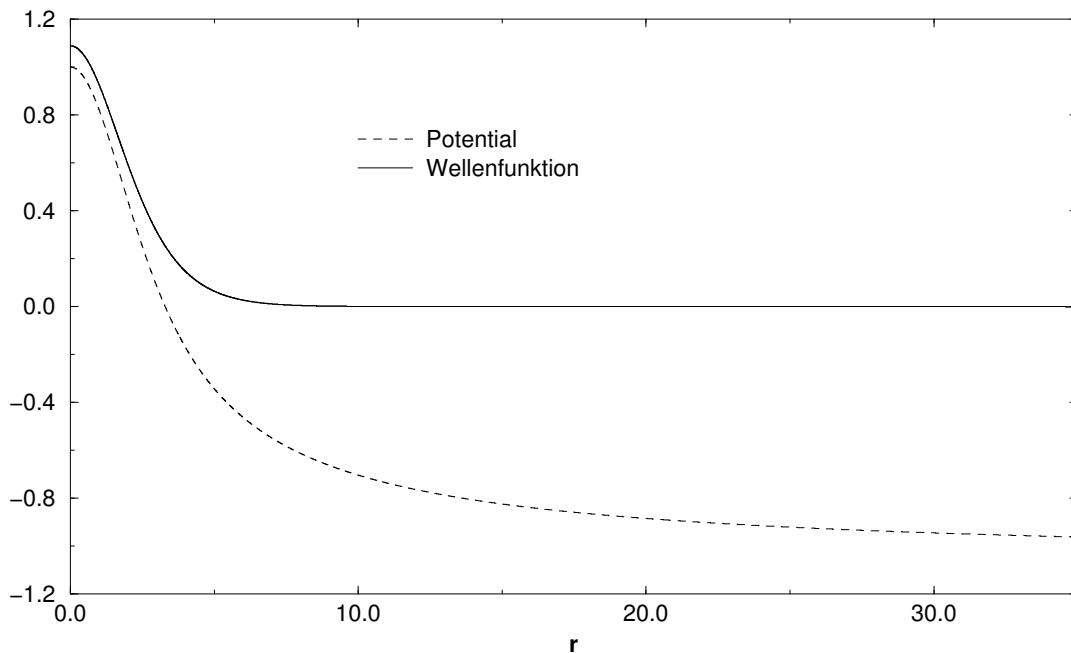


Abbildung 3.4: Wellenfunktion und Potential des Grundzustandes.

Hat man den Grundzustand gefunden, kann der zugehörige Energieeigenwert nach den Gleichungen (2.42) und (2.41) berechnet werden, wobei die Integration in

(2.41) nur bis zu einem endlichen Wert von  $r$ , für den die numerische Lösung noch stabil ist, durchgeführt wird. Die obere Integrationsgrenze wird so gewählt, daß die Lösung noch gerade im exponentiell abfallenden Bereich liegt. Daraus erhält man für den Grundzustand den dimensionslosen Eigenwert<sup>2</sup>

$$E_1 = -0,0407 \pm 0,0001 . \quad (3.16)$$

Die Dimension des Eigenwerts kann leicht bestimmt werden, indem die dimensionsbehafteten Größen aus (2.9) in die Gleichung (2.42) für den Eigenwert eingesetzt werden. Alternativ führt eine Dimensionsanalyse zum gleichen Ergebnis, wenn man die fundamentalen Konstanten aus der *Schrödinger-Newton-Gleichung* (2.4) berücksichtigt. Man findet schließlich

$$E_{SN} := \frac{G^2 m^5}{\hbar^2} . \quad (3.17)$$

### 3.2.2 Höhere gebundene Zustände

Um die höheren gebundenen Zustände zu finden, verfährt man genau wie im Falle des Grundzustandes: Die jeweiligen Anfangswerte  $S_0$  werden durch Intervallschachtelung bestimmt. Es sei  $n$  die Nummer (Quantenzahl) des  $n$ -ten gebundenen Zustandes, also desjenigen Zustandes, der gerade  $n - 1$  Nullstellen hat. Es sei  $\xi_1 \in M_0$  wieder ein beliebiger Anfangswert, mit dem die numerische Integration gestartet wird;  $N_i$  sei die Anzahl der Nullstellen der entsprechenden Lösung. Man kann jetzt eine verallgemeinerte Folge  $\{M_i\}$  definieren:

$$M_{i+1} = ]a_{i+1}, b_{i+1}] = \begin{cases} ]\xi_i, b_i] , & \text{falls } N_i > n - 1 \\ ]a_i, \xi_i] & \text{sonst} \end{cases} . \quad (3.18)$$

Wie zuvor konvergiert  $\{M_i\}$  gegen die Ein-Punktmenge  $\{S_0\}$ , so daß man durch dieses Verfahren zu jedem  $n$  eine Lösungsfunktion mit  $n - 1$  Nullstellen sowie das jeweilige Potential findet. Dabei sinken die Anfangswerte  $S_0$  mit steigender Quantenzahl  $n$ . Es gibt Grund zu der Annahme, daß zu jedem  $n$  genau ein gebundener Zustand existiert. Das numerische Ergebnis legt dies zumindest nahe. Die Eigenwerte lassen sich wie im Falle des Grundzustandes berechnen. Für die Anzahl der Nullstellen  $N_i$  in Abhängigkeit von  $\xi_i$  gilt die folgende Abschätzung aus [19]

$$\sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1}{\pi \xi_i} \leq N_i \leq \sqrt{6} \exp \frac{2}{\xi_i^2} . \quad (3.19)$$

In [20] wird von Moroz et al. ein ähnliches Verfahren zur Berechnung der Eigenlösungen vorgeschlagen. Das Kriterium zur Einschachtelung von  $S_0$  ist dabei,

<sup>2</sup>Die Fehlerabschätzung erfolgt in Abschnitt 3.2.3.

ob die Lösung  $S_i$  bei einer fest vorgegebenen Anzahl von Nullstellen nach  $+\infty$  oder  $-\infty$  divergiert. Das hat den Nachteil, daß die Zustände mit geradem bzw. ungeradem  $n$  getrennt behandelt werden müssen. Das hier vorgestellte Verfahren ist allgemein auf sämtliche Eigenwertprobleme anwendbar, bei denen gebundene Zustände mit einer definierten Anzahl von Nullstellen auftreten.

Abbildung 3.5 zeigt drei (nicht-normierte) Wellenfunktionen zu  $n = 1$ ,  $n = 3$  sowie  $n = 9$ . Die Potentiale zu den höheren gebundenen Zuständen unterscheiden sich im wesentlichen nur noch dadurch voneinander, daß ihre Nullstelle zu größeren Werten von  $r$  wandert. Ein typisches Potential für einen hohen gebundenen Zustand ist exemplarisch in Abbildung 3.6 dargestellt. Ein doppelt-logarithmischer Plot der ersten neunzehn Eigenwerte fördert ein Potenzgesetz für die Abhängigkeit der Eigenwerte von  $n$  zutage. Die Gerade in Abbildung 3.7 wurde durch einen linearen Fit erzeugt. Berücksichtigt man die Fehlergrenzen der Eigenwerte, so erhält man für die Steigung der Geraden  $m = -2.1 \pm 0.1$ . Es fällt auf, daß die letzten Eigenwerte oberhalb der Geraden liegen. Trägt man nur die Eigenwerte ab  $n = 10$  doppelt-logarithmisch auf, zeigt sich in der Tat, daß die Geradensteigung der Ausgleichsgeraden nur noch etwa  $m = -2.03 \pm 0.4$  beträgt. Das gibt Grund zu der Annahme, daß für große  $n$  asymptotisch die Beziehung

$$E_n \propto n^{-2} \quad \text{für } n \rightarrow \infty \quad (3.20)$$

gilt. Eine Tabelle der Eigenwerte befindet sich im Anhang. Moroz et al. schreiben in der bereits zitierten Arbeit [20], die Abhängigkeit der Eigenwerte von  $n$  entspräche nicht der Abhängigkeit der Balmer-Serie des Wasserstoff-Atoms (3.20). Der dort gezeigte Plot der ersten 10 Eigenwerte läßt allerdings vermuten, daß sie nicht das asymptotische Verhalten der Eigenwerte untersucht haben. Es wird sich im Verlauf dieser Arbeit in Kapitel 6 zudem zeigen, daß sich die asymptotische  $E(n)$ -Abhängigkeit mit dem Resultat (3.20) aus der WKB-Näherung für die SNG ableiten läßt. Die übrigen numerischen Ergebnisse in [20] stimmen ansonsten im wesentlichen mit den hier präsentierten überein.

### 3.2.3 Genauigkeit des Verfahrens

Der Diskretisationsfehler numerischer Verfahren zur Lösung von Differentialgleichungen hängt lokal üblicherweise von der Ordnung des Integrationsverfahrens sowie der gewählten Schrittweite ab. So hat beispielsweise ein Mehrschritt-Verfahren vierter Ordnung mit Schrittweite  $h$  einen lokalen Diskretisationsfehler in einer Größenordnung von  $\mathcal{O}(h^5)$ . Die Routine `NDSolve`, mit der die numerische Integration durchgeführt wird, verwendet allerdings unterschiedliche Verfahren mit variabler Ordnung, so daß der Fehler des verwendeten Algorithmus nicht ohne weiteres angegeben werden kann.

Dennoch ist es möglich, den Fehler der Eigenwerte zumindest grob abzuschätzen. Dafür multipliziert man (2.22) mit  $r^2$  und integriert die Gleichung bezüglich  $r$

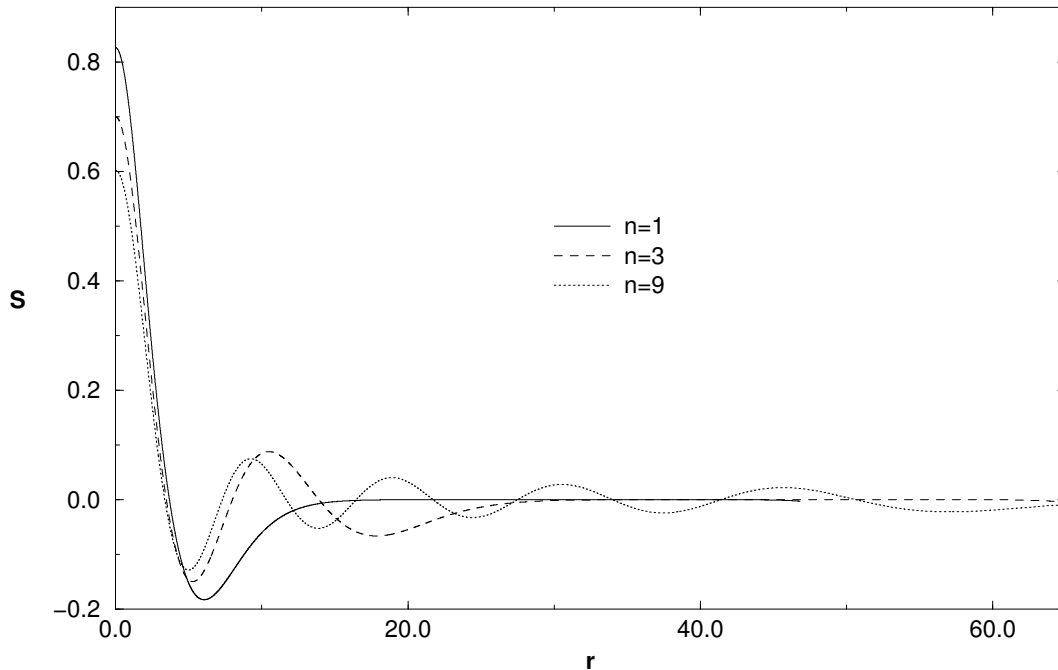


Abbildung 3.5: Wellenfunktionen des ersten, dritten und neunten gebundenen Zustandes.

von 0 bis Unendlich. So erhält man

$$\int_0^{\infty} (r^2 S'' + 2r S') dr = - \int_0^{\infty} r^2 S U dr . \quad (3.21)$$

Der Ausdruck auf der linken Seite läßt sich vereinfachen, indem nur der erste Summand partiell integriert wird. Nutzt man weiterhin aus, daß  $S(r)$  und damit  $S'(r)$  im Unendlichen exponentiell abfällt, bleibt

$$0 = -r^2 S' \Big|_0^{\infty} = \int_0^{\infty} r^2 S U dr . \quad (3.22)$$

Einsetzen des Ansatzes (2.9) für  $U$  in die letzte Gleichung ergibt dann

$$0 = 2 \int_0^{\infty} r^2 S (E - V) dr . \quad (3.23)$$

Der Eigenwert wird nach Gleichung (2.42) aus dem Potential  $U$  berechnet. Folglich bestimmt der numerische Fehler des Potentials den des Eigenwerts. Man kann nun annehmen, daß die Wellenfunktion  $S$  gegenüber dem Potential  $U$  numerisch hinreichend genau bestimmt ist.



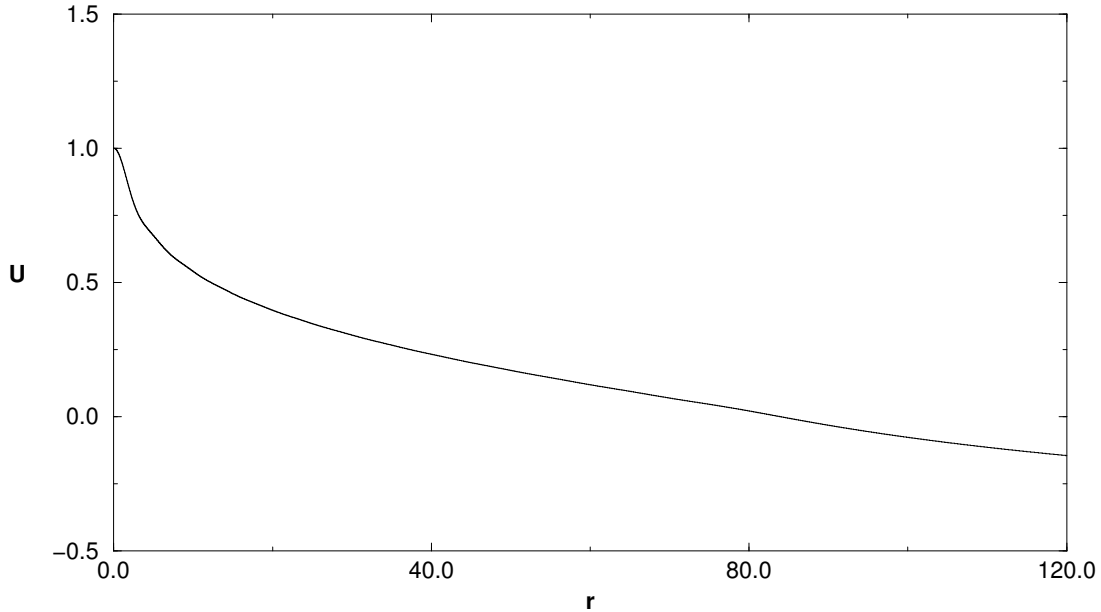


Abbildung 3.6: Potential zum zwölften gebundenen Zustand. (Die "Knicke" der Funktion in der Nähe ihres Umkehrpunktes sind vermutlich durch numerische Ungenauigkeiten bedingt.)

Es sei also  $S_{num} \approx S_{exakt}$ . Bezeichnet  $\varepsilon$  die positive Abweichung des numerischen Eigenwerts  $E_{num}$  vom exakten Eigenwert  $E_{exakt}$ , so gilt

$$\left| \int_0^\infty r^2 S (E_{num} - V) dr \right| \simeq \int_0^\infty r^2 S \varepsilon dr \quad (3.24)$$

und damit näherungsweise

$$\varepsilon = \left| \int_0^\infty r^2 S U dr \right| \left| 2 \int_0^\infty r^2 S dr \right|^{-1}. \quad (3.25)$$

Im nachhinein erweist sich Annahme als gerechtfertigt, daß der Fehler von  $S$  gegenüber  $\varepsilon$  vernachlässigt werden kann. Nimmt man statt dessen an, daß der numerische Fehler der Wellenfunktion  $\varepsilon_S$  größer ist als  $\varepsilon$ , läßt sich in Analogie zu (3.25) ein Ausdruck für  $\varepsilon_S$  finden. Es ist

$$\varepsilon_S = \left| \int_0^\infty r^2 S U dr \right| \left| 2 \int_0^\infty r^2 U dr \right|^{-1}. \quad (3.26)$$

Vergleicht man  $\varepsilon_S$  mit dem Fehler  $\varepsilon$  des Eigenwerts, so fällt auf, daß  $\varepsilon_S$  etwa um einen Faktor  $10^2$  bis  $10^3$  kleiner ist als  $\varepsilon$ . Die Fehlerabschätzung eignet sich insbesondere dazu, zu überprüfen, bis zu welcher Quantenzahl  $n$  der Algorithmus

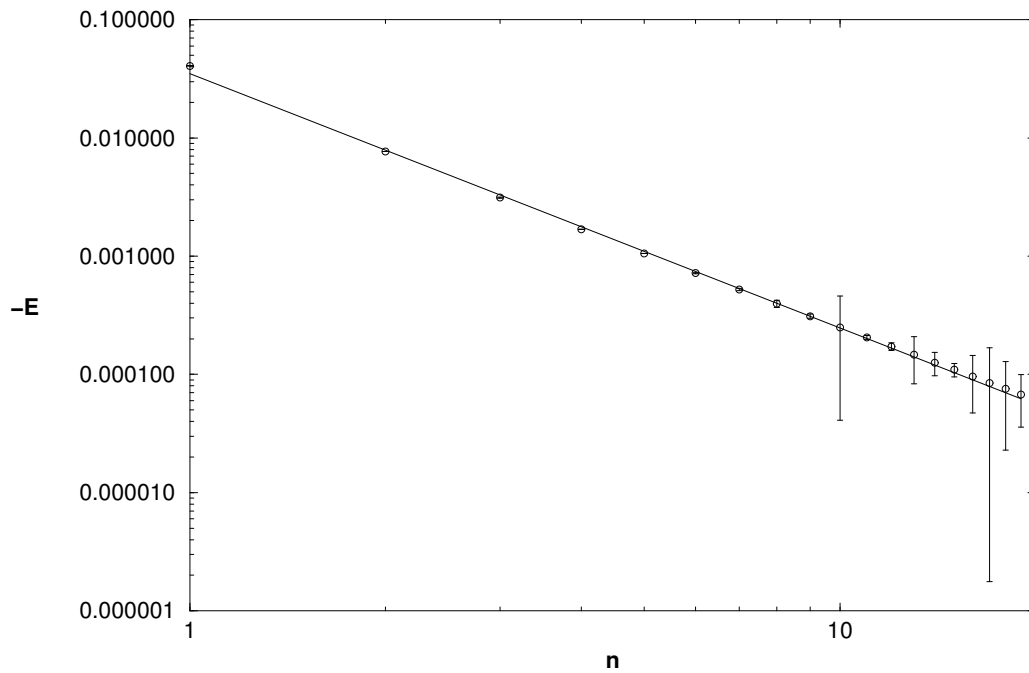


Abbildung 3.7: Doppelt-logarithmischer Plot der Eigenwerte in Abhängigkeit von der Quantenzahl  $n$ .

noch verlässliche Lösungen und Eigenwerte liefert. So zeigt sich, daß etwa ab  $n = 20$  der Fehler  $\varepsilon$  sprunghaft ansteigt. Für fast alle folgenden Eigenwerte ist  $\varepsilon$  größer als  $E$  selbst. Anhand von Abbildung 3.7 läßt sich zudem erkennen, daß bereits ab dem zehnten gebundenen Zustand der Fehler signifikant ansteigt. Aus diesem Grund soll im folgenden Teil dieser Arbeit eine Näherungslösung der SNG für große Quantenzahlen  $n$  entwickelt werden. Ziel ist es, erstens ein *effektives Potential* aus einem Näherungsansatz für die Feldgleichung (2.23) sowie zweitens eine asymptotische Formel zur Berechnung höherer Eigenwerte ähnlich wie (3.20) zu finden.

# Kapitel 4

## WKB-Näherung der SNG

Die zeitunabhängige, eindimensionale Schrödinger-Gleichung zählt zur Klasse eindimensionaler Differentialgleichungen zweiter Ordnung, für die ein allgemeines Verfahren zur näherungsweise Lösung bekannt ist. Diese Klasse wird durch die Differentialgleichungen der Form

$$s''(z) - \gamma^2 f(z)s(z) = 0, \quad \gamma \in \mathbb{R}_{>0}, \quad z \in \mathbb{C} \quad \text{und} \quad f(z) \text{ beliebig fest} \quad (4.1)$$

gebildet. Das Verfahren zur Lösung derartiger Gleichungen ist in der Literatur als *Wentzel-Kramers-Brillouin-Methode* bekannt (WKB-Methode, 1926) [6, 31]. Die zweite Bezeichnung *Liouville-Green-Näherung* wird eher selten verwendet [33]. Die radialsymmetrische Schrödinger-Gleichung läßt sich effektiv als eindimensionales Problem formulieren. Mit dem Ansatz  $X(r) = rS(r)$  erhält man aus der SNG (2.22) eine effektiv eindimensionale Differentialgleichung der oben beschriebenen Klasse, wobei  $z = r$  in diesem Fall reell und  $f(z) = -\gamma^{-2}U(r)$  ist:

$$X''(r) = -U(r)X(r). \quad (4.2)$$

Das Potential  $U$  ist dabei nach wie vor durch die (modifizierte) Feldgleichung (2.23) gegeben. Die Idee hinter dem WKB-Ansatz für die *Schrödinger-Newton-Gleichung* ist, aus der WKB-Näherung für die Wellenfunktion  $S_{wkb}$  und der Feldgleichung ein genähertes Potential  $U_{wkb}$  berechnen zu können.

### 4.1 WKB-Verfahren

Das WKB-Verfahren läßt sich vor allem auf Differentialgleichungen der Art (4.1) anwenden, bei denen die Funktion  $f(z)$  nur schwach veränderlich und  $\gamma$  ein großer Parameter ist. Im quantenmechanischen Formalismus wird  $f$  durch den Potentialterm  $-\gamma^{-2}U$  repräsentiert mit  $\hbar^{-2}$  als großem Parameter. In physikalischer Terminologie bedeutet "schwach veränderlich", daß die de-Broglie-Wellenlänge

$2\pi k(r)^{-\frac{1}{2}}$  klein gegenüber den geometrischen Abmessungen des Systems ist, wobei  $k(r) = |U(r)|^{\frac{1}{2}}$  der Wellenvektor sei.<sup>1</sup> Anders ausgedrückt: Das Potential  $U$  darf nur schwach ortsabhängig sein. Diese Bedingung ist insbesondere im Bereich großer Quantenzahlen erfüllt. Quantenmechanische Teilchen verhalten sich dann beinahe wie klassische. Hier greift das Korrespondenzprinzip zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik, weshalb das WKB-Verfahren oft als quasi-klassisches Näherungsverfahren bezeichnet wird.

Wäre die Funktion  $f$  in (4.1) konstant, das hieße  $f(z) \equiv f_0$ , ließe sich die Gleichung sofort lösen und  $s(z)$  wäre von der Form  $s(z) = e^{\pm\gamma\sqrt{f_0}z}$  (ebene Welle für  $f_0 < 0$ ). Für ein nur leicht veränderliches  $f$  sollte man daher eine Exponentialfunktion mit schwach  $z$ -abhängigem Argument erwarten. Das legt nun folgenden Ansatz nahe, der etwas modifiziert in [33] vorgeschlagen wird:

$$s(z) := \exp\left(\pm\gamma \int_{z_0}^z w(z) dz\right). \quad (4.3)$$

Setzt man den Ansatz in die Gleichung (4.1) ein, erhält man eine Riccatische Differentialgleichung für  $w$ :

$$w(z)^2 \pm \gamma^{-1}w'(z) = f(z). \quad (4.4)$$

Gemäß der Voraussetzung, daß  $\gamma$  ein großer Parameter ist, kann  $w'$  auf der linken Seite zunächst vernachlässigt werden und man erhält in erster Näherung  $w_1 = \pm f^{\frac{1}{2}}$ . Durch Einsetzen von  $w_1$  in die Differentialgleichung bekommt man schließlich die nächste Näherung  $w_2$ , also

$$w_2(z) = \pm\sqrt{f(z) \mp \gamma^{-1}w_1'(z)}. \quad (4.5)$$

Dieses Spiel ließe sich im Prinzip durch sukzessives Einsetzen der  $w_i$  in die Differentialgleichung beliebig weit fortsetzen. Die Rekursionsvorschrift lautete dann

$$w_{i+1}(z) = \pm\sqrt{f(z) \mp \gamma^{-1}w_i'(z)}. \quad (4.6)$$

Wir wollen uns jedoch hier mit der Näherung  $w \approx w_2$  zufriedengeben. Der Gültigkeitsbereich dieser Näherung wird in Abschnitt 4.1.2 abgesteckt. Somit sei

$$w := \pm\sqrt{f + \gamma^{-1}\frac{f'}{2f^{\frac{1}{2}}}} = \pm f^{\frac{1}{2}}\sqrt{1 + \gamma^{-1}\frac{f'}{2f^{\frac{3}{2}}}} \approx \pm f^{\frac{1}{2}} \pm \gamma^{-1}\frac{f'}{4f}, \quad (4.7)$$

vorausgesetzt, daß  $f' \ll 2f^{\frac{3}{2}}$  ist. Setzt man (4.7) in den Ansatz (4.3) für  $s$  ein und wertet den zweiten Summanden des Integranden aus, erhält man

$$s(z) = C_0^{\pm}|f|^{-\frac{1}{4}} \exp\left(\pm\gamma \int_{z_0}^z f^{\frac{1}{2}} dz\right), \quad (4.8)$$

---

<sup>1</sup>Die de-Broglie-Wellenlänge entspricht im Falle der SNG in etwa dem Nullstellen-Abstand der Wellenfunktion.

wobei die Konstanten  $C_0^\pm$  noch festzulegen sind. Die Schwäche des Näherungsansatzes für  $s$  liegt auf der Hand: Hat  $f$  im Definitionsbereich der Lösung eine oder mehrere Nullstellen, divergiert  $s$ . An diesen Stellen, den *Umkehrpunkten* ist der Lösungsansatz (4.8) unbrauchbar.

Im Falle der SNG mit  $f(z) = -\gamma^{-2}U(r)$  gibt es genau eine Nullstelle, so daß sich der Definitionsbereich von  $s$  in zwei Gebiete teilt: Ist  $U$  positiv, so ist  $s$  oszillierend und zerfällt in die linear unabhängigen Teillösungen  $\sin$  und  $\cos$  (*klassisch erlaubter Bereich*), für  $U < 0$  dagegen fällt oder steigt  $s$  exponentiell ab oder an (*klassisch verbotener Bereich*). Für die physikalisch relevanten Lösungen wählt man sinnvollerweise den reellen und exponentiell abfallenden Lösungszweig.

Die Korrespondenz zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik ist offensichtlich: Es sei  $s(r) = X(r)$  eine reelle Ein-Teilchen-Wellenfunktion im klassisch erlaubten Bereich. Der WKB-Ansatz lautet dann

$$X(r) = C_1^\pm U^{-\frac{1}{4}} \Re \left\{ \exp \left( \pm i \int_{r_0}^r U^{\frac{1}{2}} dr \right) \right\} \quad \text{mit } U > 0. \quad (4.9)$$

Im Falle großer Quantenzahlen, also vieler und schneller Oszillationen kann dann die Phase von  $X(r)$  (Cosinus-Term) näherungsweise durch die Wurzel des quadratischen Mittelwertes  $\frac{1}{2}$  ersetzt werden. (Abbildung 4.1). Im klassisch erlaubten Bereich wird die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens folglich durch die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$|X(r)|^2 = X(r)^2 \propto U(r)^{-\frac{1}{2}} \quad (4.10)$$

beschrieben. Substituiert man schließlich  $k(r) = U(r)^{\frac{1}{2}}$  und faßt den Wellenvektor  $k$  als eine Art Teilchenimpuls  $p(r) = \hbar k(r)$  auf, so ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens in einem Intervall  $\Delta r$  umgekehrt proportional zu seinem Impuls, das heißt zur Geschwindigkeit im Intervall  $\Delta r$ . Dies ist aus mechanischer Sicht unmittelbar einleuchtend.

### 4.1.1 WKB-Näherung in der Nähe der Umkehrpunkte

Es gibt eine Vielzahl von Verfahren, um die Lösungszweige im Bereich eines Umkehrpunktes einander anzupassen [17, 24, 32, 41, 44]. Der Umkehrpunkt werde mit  $z_0$  bezeichnet. Da die WKB-Lösung bei  $z_0$  nicht regulär ist, scheidet stetiges Anpassen der Zweige aneinander jedoch aus. Üblicherweise wird  $f$  in der Umgebung von  $z_0$  linearisiert, so daß

$$f(z) = f'(z_0)(z - z_0) + \mathcal{O}(|z - z_0|^2) \quad (4.11)$$

ist. Ohne Einschränkung der Allgemeinheit sei  $f$  negativ für  $z < z_0$  und positiv, falls  $z > z_0$  ist. Setzt man das linearisierte  $f$  in die Ausgangs-Differentialgleichung (4.1) ein, bekommt man

$$s''(z) - \gamma^2 f'_0(z - z_0)s(z) = 0 \quad \text{mit } f'_0 = f'(z_0). \quad (4.12)$$

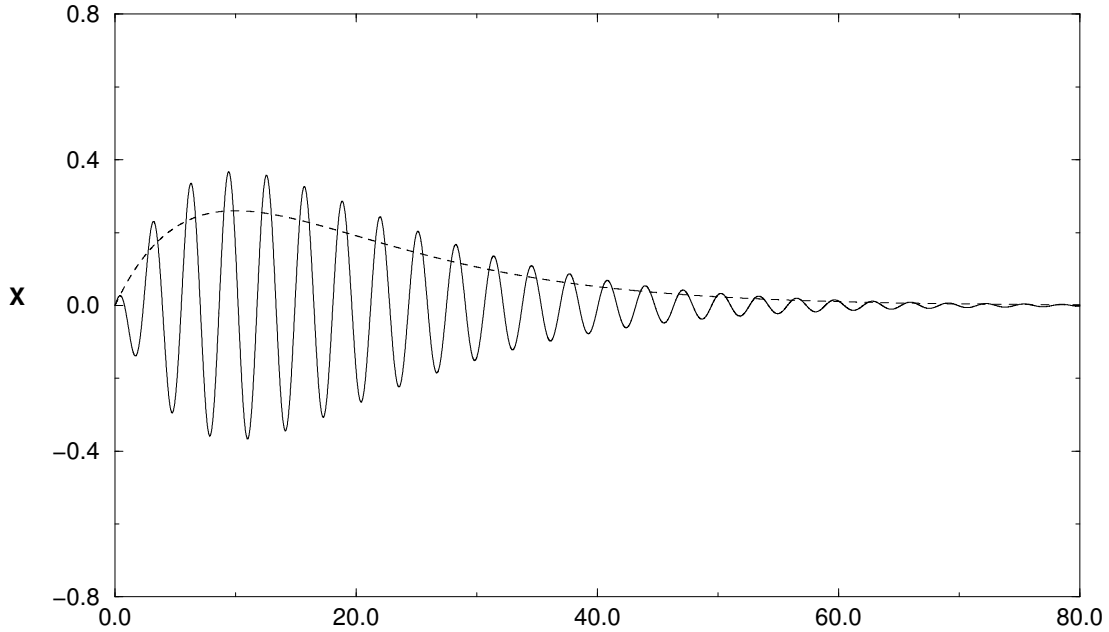


Abbildung 4.1: Wellenfunktion mit quadratisch gemittelter Phase bei großen Quantenzahlen.

Man definiert nun als neue Variable  $\zeta := (\gamma^2 f'_0)^{\frac{1}{3}}(z - z_0) \in \mathbb{R}$  und erhält eine Differentialgleichung für  $S(\zeta) = s(\zeta(z))$ :

$$S''(\zeta) - \zeta S(\zeta) = 0. \quad (4.13)$$

Gleichung (4.13) ist eine Airy-Gleichung, die als Lösung gerade die linear unabhängigen Airy-Funktionen  $\text{Ai}(\zeta)$  und  $\text{Bi}(\zeta)$  hat (Abbildung 4.2). Die Airy-Funktionen lassen sich durch die Bessel-Funktionen ausdrücken. Es sei  $I_{\pm\nu}(\zeta)$  mit  $\nu \notin \mathbb{Z}$  Lösung der modifizierten Besselschen Differentialgleichung

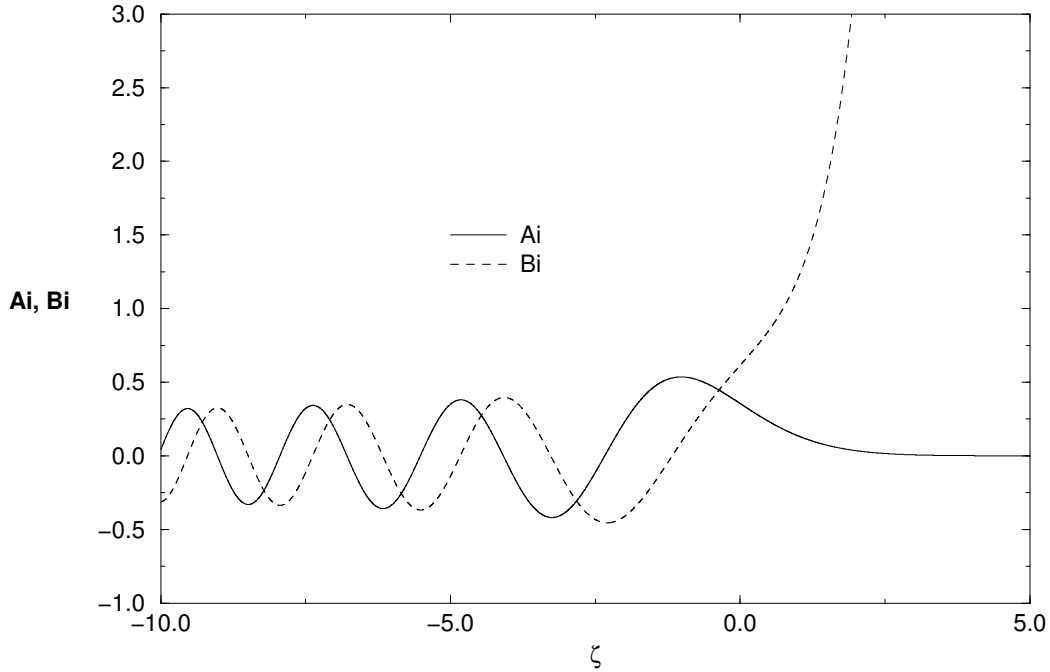
$$y(\zeta) + \frac{1}{\zeta} y'(\zeta) - \left(1 + \frac{\nu^2}{\zeta^2}\right) y(\zeta) = 0. \quad (4.14)$$

Damit schreiben sich die Airy-Funktionen als

$$\text{Ai}(\zeta) = \frac{\zeta^{\frac{1}{2}}}{3} \left( I_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\zeta^{\frac{3}{2}}\right) - I_{+\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\zeta^{\frac{3}{2}}\right) \right) \quad (4.15)$$

sowie

$$\text{Bi}(\zeta) = \left(\frac{\zeta}{3}\right)^{\frac{1}{2}} \left( I_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\zeta^{\frac{3}{2}}\right) + I_{+\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\zeta^{\frac{3}{2}}\right) \right). \quad (4.16)$$

Abbildung 4.2: Airy-Funktionen  $Ai(\zeta)$  und  $Bi(\zeta)$ .

Entscheidend ist, daß die Airy-Funktionen asymptotisch für  $\zeta \rightarrow \pm\infty$  in die WKB-Lösung der Airy-Gleichung (4.13)

$$S_{wkb}(\zeta) = C_0^\pm |\zeta|^{-\frac{1}{4}} \exp\left(\pm \int_0^\zeta \zeta'^{\frac{1}{2}} d\zeta'\right) = C_0^\pm |\zeta|^{-\frac{1}{4}} \exp\left(\pm \frac{2}{3} \zeta^{\frac{3}{2}}\right) \quad (4.17)$$

mit den entsprechenden  $C_0^\pm$  übergehen. In [6] wurde gezeigt, daß (4.1) nicht nur in der Umgebung des Umkehrpunktes, sondern auf ganz  $\mathbb{R}$  durch die Airy-Gleichung approximiert werden kann (*gleichmäßige Approximation*). Zu diesem Zweck definieren wir  $\zeta(z)$  auf dem gesamten Definitionsbereich der WKB-Lösung und zwar derart, daß

$$\frac{2}{3} \zeta(z)^{\frac{3}{2}} = \gamma \int_{z_0}^z |f(z')|^{\frac{1}{2}} dz' \quad \text{für } f < 0, \quad (4.18)$$

$$\frac{2}{3} \zeta(z)^{\frac{3}{2}} = e^{\pm \frac{3\pi i}{2}} \gamma \int_{z_0}^z f(z')^{\frac{1}{2}} dz' \quad \text{für } f > 0. \quad (4.19)$$

Der Phasenfaktor in (4.19) sorgt dafür, daß  $\zeta$  im klassisch verbotenen Gebiet reell und negativ ist. Offenbar ist für  $z \rightarrow z_0$  Gleichung (4.18) mit dem Ausdruck  $\zeta = (\gamma^2 f_0')^{\frac{1}{3}} (z - z_0)$  äquivalent. In den Airy-Funktionen ausgedrückt, lautet dann

die genäherte WKB-Lösung

$$\chi(z) = C_0^- \left| \frac{\zeta(z)}{f(z)} \right|^{\frac{1}{4}} \text{Ai}(\zeta(z)) + C_0^+ \left| \frac{\zeta(z)}{f(z)} \right|^{\frac{1}{4}} \text{Bi}(\zeta(z)). \quad (4.20)$$

Die Funktion  $\text{Bi}(\zeta)$  ist für  $\zeta \rightarrow \infty$  unbeschränkt, so daß für physikalisch relevante, sprich normierbare, Lösungen  $C_0^+ = 0$  gefordert werden muß. Setzt man die asymptotischen Formen der Airy-Funktion in die WKB-Lösung ein, so erhält man schließlich die beiden Lösungszeige für  $f < 0$  und  $f > 0$ :

$$s_+(z) = \frac{C}{\sqrt{\pi}} |f(z)|^{-\frac{1}{4}} \cos \left( \gamma \int_{z_0}^z |f(z')|^{\frac{1}{2}} dz' - \frac{\pi}{4} \right) \quad \text{für } f < 0, \quad (4.21)$$

$$s_-(z) = \frac{C}{\sqrt{\pi}} f(z)^{-\frac{1}{4}} \exp \left( -\gamma \int_{z_0}^z f(z')^{\frac{1}{2}} dz' \right) \quad \text{für } f > 0, \quad (4.22)$$

wobei  $C$  eine Normierungskonstante sei.<sup>2</sup> Zwar konvergieren  $s_+$  und  $s_-$  für große  $z$  gleichmäßig gegen die exakte Lösung von (4.1), dennoch bleiben sie als Lösung an den Umkehrpunkten nach wie vor unbrauchbar. Der Umweg über die asymptotischen Formen von  $\text{Ai}(z)$  diente lediglich dazu, die beiden Lösungszeige mit den Konstanten  $C_0^+$  und  $C_0^-$  zu bestimmen. Üblicherweise werden (4.21) und (4.22) als eigentliche WKB-Lösung bezeichnet. Teilweise bietet sich dennoch an, zum Beispiel bei der graphischen Darstellung der Lösungen, die Airy-Näherung  $\chi(z)$  als *globale* WKB-Lösung für den gesamten Definitionsbereich zu verwenden. Damit sind jetzt die methodischen Voraussetzungen gegeben, um aus der SNG näherungsweise eine analytische Lösung des Potentials für hohe Quantenzahlen  $n$  zu berechnen. Zur Anwendung muß jedoch zunächst noch beleuchtet werden, unter welchen Voraussetzungen das WKB-Verfahren anwendbar ist.

### 4.1.2 Gültigkeitsbereich der WKB-Näherung

Die bisherige Aussage über die Gültigkeit des WKB-Ansatzes beschränkte sich auf die vage Formulierung, daß die Funktion  $f$  bezüglich  $z$  nur schwach veränderlich sein dürfe. Um den Gültigkeitsbereich genauer abzustecken, könnte man beispielsweise die Rekursion der  $w_i$  weiter fortsetzen und untersuchen, ab welchem  $w_k$  die Bedingung  $w_{k+l} \ll w_k$  für sämtliche  $l > 0$  erfüllt ist, so daß die Rekursion abgebrochen werden kann. In unserem Falle müßte geprüft werden, ob tatsächlich nach  $w_2$  alle weiteren Reihenglieder vernachlässigt werden können.

Es erscheint allerdings etwas einfacher, sich dem Problem von der anderen Seite zu nähern. Dazu sieht man sich die Differentialgleichung an, deren exakte Lösung

---

<sup>2</sup>Die asymptotischen Formen der Airy-Funktionen findet man beispielsweise in [21]. Zur Vereinfachung der Schreibweise wird im folgenden der Vorfaktor  $\pi^{-\frac{1}{2}}$  mit in die Normierungskonstante  $C$  geschrieben.



die allgemeine WKB-Lösung (4.8) ist. Zweifaches Ableiten von  $s$  für  $z \neq z_0$  führt auf

$$s''(z) = \left( \frac{5}{16} \left( \frac{f'}{f} \right)^2 + \gamma^2 f - \frac{f''}{f^2} \right) C_0^\pm |f|^{-\frac{1}{4}} \exp \left( \pm \gamma \int_{z_0}^z f^{\frac{1}{2}} dz \right). \quad (4.23)$$

Danach löst  $s$  die Differentialgleichung

$$s''(z) - (\gamma^2 f(z) + \varepsilon(z)) s(z) = 0 \quad \text{mit} \quad \varepsilon(z) = \frac{5}{16} \left( \frac{f'}{f} \right)^2 - \frac{f''}{f^2}. \quad (4.24)$$

Der Vergleich mit der ursprünglichen Gleichung (4.1) zeigt, daß der WKB-Ansatz genau dann gerechtfertigt ist, wenn

$$\left| \left( \frac{5}{16} \left( \frac{f'}{f} \right)^2 - \frac{f''}{f^2} \right) f^{-1} \right| = \left| \frac{5}{16f} \left( \frac{f'}{f} \right)^2 - \frac{f''}{f^3} \right| \ll \gamma^2 \quad (4.25)$$

ist. Offensichtlich ist dieses Gültigkeitskriterium nur weit weg von irgendwelchen Umkehrpunkten erfüllbar, wo  $f = 0$  ist. An den Umkehrpunkten ist die WKB-Lösung singular und ohnehin keine brauchbare Näherung mehr für (4.1).

In gleicher Weise läßt sich ein Gültigkeitskriterium für die Airy-Näherung (4.20) angeben. Die Funktion  $\chi$  ist Lösung der Differentialgleichung

$$\chi''(z) - (\gamma^2 f(z) + \delta(z)) \chi(z) = 0 \quad \text{mit} \quad \delta(z) = -\zeta'^{\frac{1}{2}} \frac{d^2}{d^2 r} |\zeta'|^{-\frac{1}{2}}. \quad (4.26)$$

Analog zu (4.25) ist  $\chi$  gerade dann eine akzeptable Näherung für (4.1), wenn gilt:

$$\left| \zeta'^{\frac{1}{2}} \frac{d^2}{d^2 r} |\zeta'|^{-\frac{1}{2}} f^{-1} \right| \ll \gamma^2. \quad (4.27)$$

Nach Voraussetzung ist am Umkehrpunkt  $\delta(z) = 0$  und die Airy-Näherung exakt. Weit weg vom Umkehrpunkt ist nach [6] allerdings (4.27) ein schwächeres Kriterium als (4.25). Jedoch konvergiert die Airy-Näherung für  $z \rightarrow \pm\infty$  gegen die eigentlichen WKB-Lösungen (4.21) und (4.22).

# Kapitel 5

## Die WKB-Gleichung

Um mittels WKB-Ansatz für die *Schrödinger-Newton-Gleichung* das Potential berechnen zu können, wird zunächst die Wellenfunktion  $S$  in der WKB-Näherung als Funktion von  $U$  formuliert. Mit der WKB-Wellenfunktion kann dann die Feldgleichung für das Potential (2.23) zu einer einzigen Differentialgleichung für  $U$  umgeschrieben werden. Durch die Substitution  $X(r) = rS(r)$  erhält man aus (2.22) Gleichung (4.2), auf die sich die WKB-Methode anwenden läßt. Die allgemeine WKB-Lösung für  $X$  ist dann

$$X_{wkb}(r) = C_1^\pm |U(r)|^{-\frac{1}{4}} \exp\left(\pm \int_{r_0}^r (-U(r'))^{\frac{1}{2}} dr'\right) \quad \forall r > 0, \quad (5.1)$$

wobei  $U(r_0) = 0$  sei; in dem Gebiet  $r < r_0$  ist  $U$  positiv, für  $r > r_0$  dagegen negativ. Rücksubstitution ergibt schließlich die allgemeine WKB-Lösung für  $S$

$$S_{wkb}(r) = \frac{C_1^\pm}{r} |U(r)|^{-\frac{1}{4}} \exp\left(\pm \int_{r_0}^r (-U(r'))^{\frac{1}{2}} dr'\right) \quad \forall r > 0. \quad (5.2)$$

Im klassisch erlaubten Bereich  $U > 0$  kann bei großen Quantenzahlen  $n$  die vereinfachte Form (4.10) für  $X_{wkb}$  bzw.  $S_{wkb}$  als hinreichende Näherung angenommen werden (Abbildung 4.1). Dagegen ist im klassisch verbotenen Bereich  $U < 0$  das exponentielle Abfallen der Wellenfunktion charakteristisch.<sup>1</sup> Für große  $r$  kann  $U$  näherungsweise als konstant angenommen werden. Unterscheidet man also die beiden Gebiete  $r < r_0$  und  $r > r_0$ , scheint folgender Ansatz gerechtfertigt zu sein:

$$S_+(r) = \frac{C}{r} U(r)^{-\frac{1}{4}} \quad \text{für } U > 0, \quad (5.3)$$

$$S_-(r) = \frac{C^*}{r} \exp\left(-\int_{r_0}^r \sqrt{|U(r')|} dr'\right) \quad \text{für } U < 0. \quad (5.4)$$

Die Konstanten  $C$  und  $|U_\infty|^{-\frac{1}{4}} \approx |U(r)|^{-\frac{1}{4}}$  wurden in der letzten Gleichung zu  $C^*$  zusammengefaßt. Wenn man nun die beiden Lösungszweige in die Feldgleichung

---

<sup>1</sup>Im folgenden wird auf die Bezeichnung "wkb" verzichtet, da Verwechslungen zwischen WKB-Lösungen und numerischen bzw. exakten Lösungen nicht zu befürchten sind.

$\Delta U = -S^2$  einsetzt, erhält man zwei *WKB-Gleichungen* für das Potential. Mit einer weiteren Näherung im Ansatz (5.4) für den klassisch verbotenen Bereich lassen sich beide Gleichungen analytisch lösen. Durch stetiges und differenzierbares "Anstückeln" kann die Lösung auf ganz  $\mathbb{R}_{>0}$  fortgesetzt werden.

## 5.1 Klassisch erlaubtes Gebiet

Man betrachte zunächst das klassisch erlaubte Gebiet, in dem  $U$  positiv ist. In diesem Gebiet lautet die *WKB-Gleichung* nach dem Ansatz (5.3)

$$U''(r) + \frac{2}{r}U'(r) + \frac{C^2}{r^2}U(r)^{-\frac{1}{2}} = 0. \quad (5.5)$$

Eine äquivalente Form ist

$$\frac{d}{dr} \{r^2 U'(r)\} = -C^2 U(r)^{-\frac{1}{2}}. \quad (5.6)$$

Integration von 0 bis  $r < r_0$  ergibt

$$r^2 U'(r) = -C^2 \int_0^r U(r')^{-\frac{1}{2}} dr' + \beta_{-1} \quad \text{mit} \quad \beta_{-1} < 0. \quad (5.7)$$

Das asymptotische Verhalten der Lösung  $U$  wird erst in Abschnitt 5.3 behandelt. Dort wird sich zeigen, daß  $r^2 U'$  am Ursprung endlich ist. Die negative Konstante  $\beta_{-1}$  bezeichnet den Grenzwert  $r^2 U'$  für  $r \rightarrow 0$ . Damit ist klar, daß  $U'(r)$  am Ursprung gegen  $-\infty$  divergiert. Aus der asymptotischen Entwicklung für  $U$  wird zudem deutlich, daß  $U$  für  $0 < r \leq r_0$  streng monoton fallend ist.

Die Substitution  $Y(r) = rU(r)$  führt auf eine Emden-Fowler-Differentialgleichung

$$Y''(r) + C^2(rY(r))^{-\frac{1}{2}} = 0, \quad (5.8)$$

In der Literatur, insbesondere in [2] finden sich einige spezielle Lösungen von Gleichungen dieser Klasse. Für den hier vorliegenden, speziellen Fall  $C^2 > 0$  ist jedoch bisher keine Lösung bekannt.

Wie die SNG läßt sich auch die *WKB-Gleichung* durch eine geeignete Symmetrietransformation in eine autonome Differentialgleichung umwandeln. Man betrachte dazu eine 3-parametrische Gruppe von Skalierungstransformationen  $\Gamma(\lambda, \mu, \sigma)$ , die wie folgt definiert ist

$$\tilde{U}(r) = (\Gamma \circ U)(r) = \lambda U(\mu r) \quad \text{und} \quad \tilde{C} = \Gamma \circ C = \sigma C, \quad (5.9)$$

wobei  $\lambda$ ,  $\mu$  und  $\sigma$  allesamt positive, reelle Parameter seien. Zweifaches Ableiten von  $U$  führt auf  $\tilde{U}(r) = \lambda \mu^2 U''(\mu r)$ . Ist also  $U(r)$  Lösung der *WKB-Gleichung*

(5.5), dann ist  $\tilde{U}(r)$  genau auch eine Lösung, wenn gilt:

$$\lambda\mu^2 U''(\mu r) + \frac{2}{r}\lambda\mu U'(\mu r) + \frac{\sigma C^2}{r^2}(\lambda U(\mu r))^{-\frac{1}{2}} = 0 \quad \text{und} \quad (5.10)$$

$$U''(\mu r) + \frac{2}{\mu r}U'(\mu r) + \frac{C^2}{(\mu r)^2}U(\mu r)^{-\frac{1}{2}} = 0. \quad (5.11)$$

Das ist gerade der Fall, wenn  $\sigma\lambda^{-\frac{3}{2}} = 1$  ist. In diesem Fall kann  $\mu$  beliebig gewählt werden. Das bedeutet, daß  $U$  invariant unter der Gruppe  $\{g^\mu\}$  der Dilatationen

$$U(r) \mapsto U(\mu r) \quad (5.12)$$

ist. Gemäß der Vorgehensweise bei der numerischen Behandlung der SNG, wählen wir als Parametrisierung von  $\{g^\mu\}$  wieder  $\mu = e^t$  und betrachten das Richtungsfeld der *WKB-Gleichung* bei  $r = 1$ . Wir definieren ferner eine Funktion  $x(t)$  in der Art, daß

$$x(t) = U(e^t). \quad (5.13)$$

Damit erhalten wir für die erste und zweite Ableitung von  $U$

$$U'(r) = \frac{dt}{dr} \frac{dx}{dt} = e^{-t} \dot{x}(t) \quad (5.14)$$

sowie

$$U''(r) = \frac{dt}{dr} \frac{d\dot{x}}{dt} = -e^{-2t} (\dot{x}(t) - \ddot{x}(t)). \quad (5.15)$$

Einsetzen in (5.5) ergibt eine autonome *WKB-Gleichung*

$$\ddot{x}(t) + \dot{x}(t) + C^2 x(t)^{-\frac{1}{2}} = 0. \quad (5.16)$$

Es wurde angenommen, daß  $U$  im Intervall  $]0, r_0]$  streng monoton fallend ist. Nach Gleichung (5.14) gilt somit auch für  $x$ , daß

$$\dot{x}(t) < 0 \quad \forall t \in M = ]-\infty, t_0], \quad (5.17)$$

wobei  $t_0 = \ln r_0$  ist. Folglich gibt es zu  $x(t)$  in  $M$  eine Umkehrfunktion  $t(x)$  und wir können eine Funktion  $p(x) = \dot{x}(t(x))$  definieren, so daß

$$\ddot{x}(t) = \frac{dp}{dt} = \frac{dp}{dx} \frac{dx}{dt} = p'(x)p(x) \quad (5.18)$$

ist. Es sei nun  $x$  die unabhängige,  $p$  die abhängige Variable. Damit schreibt sich die autonome *WKB-Gleichung* (5.16) als

$$p(x)p'(x) + p(x) + C^2 x^{-\frac{1}{2}} = 0. \quad (5.19)$$

Eine weitere Variablensubstitution mit  $s = -2C\sqrt{x}$  führt auf  $dx = \frac{s}{2C^2}ds$  und damit zu der Gleichung für  $P(s) = p(-2C\sqrt{x})$

$$P(s)P'(s) + \frac{s}{2C^2}P(s) = 1, \quad (5.20)$$

die eine Abelsche Gleichung zweiter Art ist. Für einige dieser nicht-linearen Gleichungen, die allesamt die Form  $P(s)P'(s) - f(s)P(s) = g(s)$  haben, sind in der Literatur Lösungen bekannt. In [2] wird für den hier vorliegenden, speziellen Fall eine Substitution vorgeschlagen, die auf eine parametrische Lösung der speziellen Riccati-Gleichung führt. Dazu wird ein Parameter  $\alpha$  wie folgt definiert:

$$\alpha := P(s) + \frac{s^2}{4C^2}. \quad (5.21)$$

Implizites Differenzieren des Parameters ergibt die Beziehung

$$\frac{d\alpha}{d\alpha} = 1 = \frac{dP}{ds} \frac{ds}{d\alpha} + \frac{s}{2C^2} \frac{ds}{d\alpha}, \quad (5.22)$$

die leicht zu

$$s'(\alpha) \left( P'(s) + \frac{s}{2C^2} \right) = 1 \quad (5.23)$$

umgeformt werden kann. Ein Vergleich mit der Differentialgleichung (5.20) für  $P(s)$  zeigt, daß  $s'(\alpha) = P(s(\alpha))$  ist. Mit (5.21) folgt schließlich die spezielle Riccati-Gleichung für  $s(\alpha)$ :

$$s'(\alpha) + \frac{s(\alpha)^2}{4C^2} - \alpha = 0. \quad (5.24)$$

Die spezielle Riccati-Gleichung ist hinlänglich bekannt [2, 3, 46]. Ihre Lösung läßt sich durch die Airy-Funktionen ausdrücken. Es sei also

$$s(\alpha) = 4C^2 \frac{u'(\alpha)}{u(\alpha)}. \quad (5.25)$$

Differentiation bezüglich  $\alpha$  und Einsetzen in (5.24) ergibt, daß  $u(\alpha)$  dann Lösung der Gleichung

$$4C^2 u''(\alpha) - \alpha u(\alpha) = 0 \quad (5.26)$$

ist. Ersetzt man jetzt noch die Variable  $\alpha$  durch  $\tau = (2C)^{-\frac{2}{3}}\alpha$ , dann löst die Funktion  $w(\tau) = u((2C)^{-\frac{2}{3}}\alpha)$  die Airy-Gleichung

$$w''(\tau) - \tau w(\tau) = 0. \quad (5.27)$$

Damit hat man bereits eine Parametrisierung für  $x$  und  $U$  gefunden. Es ist

$$U(\alpha) = x(\alpha) = \frac{s(\alpha)^2}{4C^2} = 4C^2 \left( \frac{w'((2C)^{-\frac{2}{3}}\alpha)}{w((2C)^{-\frac{2}{3}}\alpha)} \right)^2 \quad (5.28)$$

mit  $w$  als den Lösungen der Airy-Gleichung. Um eine vollständige, parametrische Lösung  $\{U(\alpha), r(\alpha)\}$  der *WKB-Gleichung* zu erhalten, muß noch eine parametrische Form für  $r$  entwickelt werden. Da  $r = e^t$  ist, kann dies jedoch ebensogut für die Variable  $t$  durchgeführt werden. Es sei  $t_0 = t(\alpha_0)$ . Dann gilt

$$t - t_0 = \int dt = \int \frac{dt}{dx} dx . \quad (5.29)$$

Verwendet man weiter die Beziehung  $p(x) = \dot{x}(t)$  und substituiert  $x$  durch  $s$ , so bleibt

$$t - t_0 = \frac{1}{2C^2} \int \frac{s}{P(s)} ds = \frac{1}{2C^2} \int \frac{s(\alpha)s'(\alpha)}{P(s(\alpha))} d\alpha . \quad (5.30)$$

Ein letzter Substitutions-Schritt führt dann zu

$$t - t_0 = \frac{1}{2C^2} \int s(\alpha) d\alpha = 2 \int \frac{1}{u(\alpha)} \frac{du}{d\alpha} d\alpha , \quad (5.31)$$

wobei ausgenutzt wurde, daß  $P(s) = s'(\alpha)$  ist. Das Integral läßt sich jetzt sofort auswerten:

$$t - t_0 = 2 \ln \frac{u}{u_0} . \quad (5.32)$$

Nach Voraussetzung ist  $t_0 = 2 \ln u_0$  und man erhält für  $r$

$$r(\alpha) = e^{t(\alpha)} = u(\alpha)^2 = w((2C)^{-\frac{2}{3}}\alpha)^2 . \quad (5.33)$$

Die vollständige, parametrische Lösung  $\{r, U\}$  der *WKB-Gleichung* im klassisch erlaubten Gebiet lautet somit

$$\{r, U\} : \quad \alpha \mapsto \left\{ w((2C)^{-\frac{2}{3}}\alpha)^2, 4C^2 \left( \frac{w'((2C)^{-\frac{2}{3}}\alpha)}{w((2C)^{-\frac{2}{3}}\alpha)} \right)^2 \right\} . \quad (5.34)$$

## 5.2 Klassisch verbotenes Gebiet

Im klassisch verbotenen Gebiet, das durch  $U < 0$  charakterisiert ist, gelte die Näherung (5.4) für die Wellenfunktion. Da für große  $r$  das Potential näherungsweise konstant ist und gegen den (zweifachen) Eigenwert konvergiert, kann das Integral umgeschrieben werden. Ohnehin gilt die WKB-Näherung nur weit weg

vom Umkehrpunkt, das heißt für  $r \gg r_0$ . Es sei also  $U \approx U_\infty$  für sämtliche  $r \geq r_1 > r_0$ . Dann ist

$$S_-(r) \simeq \frac{C^*}{r} \exp \left( - \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{|U(r)|} dr - \int_{r_1}^r \sqrt{|U_\infty|} dr \right) \quad \forall r > r_1. \quad (5.35)$$

Das erste Integral hängt nicht mehr von  $r$  ab, sondern ist eine Konstante. Das zweite Integral kann problemlos ausgewertet werden. Faßt man anschließend sämtliche Konstanten zu einer einzigen zusammen, bekommt  $S_-$  folgende, einfache Form

$$S_-(r) \simeq \frac{C^{**}}{r} \exp \left( -\sqrt{|U_\infty|} r \right), \quad (5.36)$$

wobei die Konstante

$$C^{**} = C \exp \left( - \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{|U(r)|} dr + \sqrt{|U_\infty|} r_1 \right). \quad (5.37)$$

ist. Daraus erhält man eine *WKB-Gleichung* für das klassisch verbotene Gebiet  $r > r_0$ . Streng genommen, gilt die Lösung wegen der Näherung (5.35) sogar nur für  $r \geq r_1$ . Die stetige Anpassung der Zweige aneinander wird jedoch zeigen, daß die Lösung dennoch als hinreichende Näherung im Bereich  $r_0 < r < r_1$  akzeptabel ist. Die *WKB-Gleichung* lautet nun

$$U''(r) + \frac{2}{r} U'(r) + \frac{C^{**2}}{r^2} e^{-2\sqrt{|U_\infty|} r} = 0. \quad (5.38)$$

Wie auch im klassisch erlaubten Bereich ist  $U$  invariant unter der Gruppe  $\{g^\mu\}$  der Dilatationen  $r \mapsto \mu^{-1}r$ . Mit der Substitution  $Y(r) = rU(r)$  bekommt man eine separierbare Differentialgleichung, die elementar zu integrieren ist:

$$Y''(r) + \frac{C^{**2}}{r} e^{-2\sqrt{|U_\infty|} r} = 0. \quad (5.39)$$

Integration der Gleichung von  $\infty$  bis  $r$  führt auf

$$Y'(r) - Y'_\infty = -C^{**2} \int_{-\infty}^{\rho} \frac{e^{\rho'}}{\rho'} d\rho'. \quad (5.40)$$

Dabei wurde  $\rho = -2\sqrt{|U_\infty|} r$  substituiert. Ferner wurde angenommen, daß  $Y'$  im Unendlichen beschränkt ist. Das bestimmte Integral auf der rechten Seite der Gleichung wird *Integraleponentialfunktion* genannt und mit  $\text{Ei}(\rho)$  bezeichnet. Integriert man die Gleichung ein weiteres Mal formal von einem  $R \in ]r_0, r_1]$  bis  $r$ , wobei die rechte Seite partiell integriert wird, erhält man schließlich

$$Y(r) = K_R + Y'_\infty r - \frac{C^{**2} e^{-2\sqrt{|U_\infty|} r}}{2\sqrt{|U_\infty|}} - C^{**2} r \text{Ei}(-2\sqrt{|U_\infty|} r). \quad (5.41)$$

Die Konstante  $K_R$  faßt sämtliche Integrationskonstanten der Lösung zusammen:

$$K_R = Y(R) - Y'_\infty R + \frac{C^{**2} e^{-2\sqrt{|U_\infty|}R}}{2\sqrt{|U_\infty|}} + C^{**2} R \operatorname{Ei}(-2\sqrt{|U_\infty|}R). \quad (5.42)$$

Rücksubstitution zu  $U$  ergibt

$$U(r) = \frac{K_R}{r} + U_\infty - \frac{C^{**2} e^{-2\sqrt{|U_\infty|}r}}{2\sqrt{|U_\infty|}r} - C^{**2} \operatorname{Ei}(-2\sqrt{|U_\infty|}r). \quad (5.43)$$

Hier wurde ausgenutzt, daß  $Y'_\infty = U_\infty$  ist, was sich unmittelbar aus der Differentialgleichung (5.39) oder aus (5.40) ergibt. Ein numerischer Vergleich der beiden letzten Summanden mit den übrigen zeigt, daß diese für große  $r$ , insbesondere also für  $r > r_0$  vernachlässigt werden können. Damit erhält man nun für  $U$  eine WKB-Lösung, die mit der asymptotischen Form (2.41) des SNG-Potentials übereinstimmt:

$$U(r) := U_\infty + \frac{K_R}{r}. \quad (5.44)$$

Die beiden Integrationskonstanten  $U_\infty$  und  $K_R$  lassen sich durch stetiges und differenzierbares (glattes) Anpassen der Lösung an den Zweig im klassisch erlaubten Gebiet festlegen.

### 5.3 WKB-Lösung

Für das Potential aus der SNG galten die Anfangsbedingungen  $U_0 = 1$  und  $U'_0 = 0$ , die sich aus der Reihenentwicklung von  $U$  bei 0 ergaben. Einsetzen der Reihenentwicklung (2.38) in die *WKB-Gleichung* (5.5) zeigt allerdings sofort, daß diese nicht miteinander verträglich sind. Daher wird zunächst das Verhalten der Lösung (5.34) am Ursprung untersucht.

Wegen des Wurzel-Terms in (5.5) empfiehlt es sich,  $U$  in gebrochenen, positiven sowie negativen Potenzen zu entwickeln. Das heißt

$$U(r) = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \beta_{\frac{i}{2}} r^{\frac{i}{2}}. \quad (5.45)$$

Nach Gleichung (5.33) ist  $r(\alpha) = u(\alpha)^2$ . Es sei nun  $\alpha_1$  eine Nullstelle von  $r(\alpha)$ . Dann läßt sich  $u(\alpha)$  in der Umgebung von  $\alpha_1$  in eine Potenzreihe entwickeln:

$$u(\alpha) = u'(\alpha_1)(\alpha - \alpha_1) + \frac{\alpha_1 u'(\alpha_1)}{3!}(\alpha - \alpha_1)^3 + \mathcal{O}(|\alpha - \alpha_1|^4). \quad (5.46)$$



Ein Vergleich mit (5.28) führt auf

$$U(\alpha) = \left( \frac{u'(\alpha)}{u(\alpha)} \right)^2 = \frac{1}{(\alpha - \alpha_1)^2} + \frac{2\alpha_1}{3} + \mathcal{O}(|\alpha - \alpha_1|). \quad (5.47)$$

Offenbar bricht die Reihe (5.45) für negative Potenzen bereits bei einem endlichen  $i$  ab. Sinnvollerweise wird die übrige Entwicklung nur bis zu dem konstanten Term durchgeführt und der Rest  $\mathcal{O}(|\alpha - \alpha_1|)$  vernachlässigt.

Substituiert man in (5.47) die Variable  $\alpha$  durch  $r$  in niedrigster Ordnung gemäß

$$r(\alpha - \alpha_1) = u'(\alpha_1)^2(\alpha - \alpha_1)^2 + \mathcal{O}(|\alpha - \alpha_1|^6), \quad (5.48)$$

erhält man

$$U(r) = \frac{\beta_{-1}}{r} + \frac{2\alpha_1}{3} + \mathcal{O}(r^{\frac{1}{2}}) \quad \text{mit} \quad \beta_{-1} = u'(\alpha_1)^2. \quad (5.49)$$

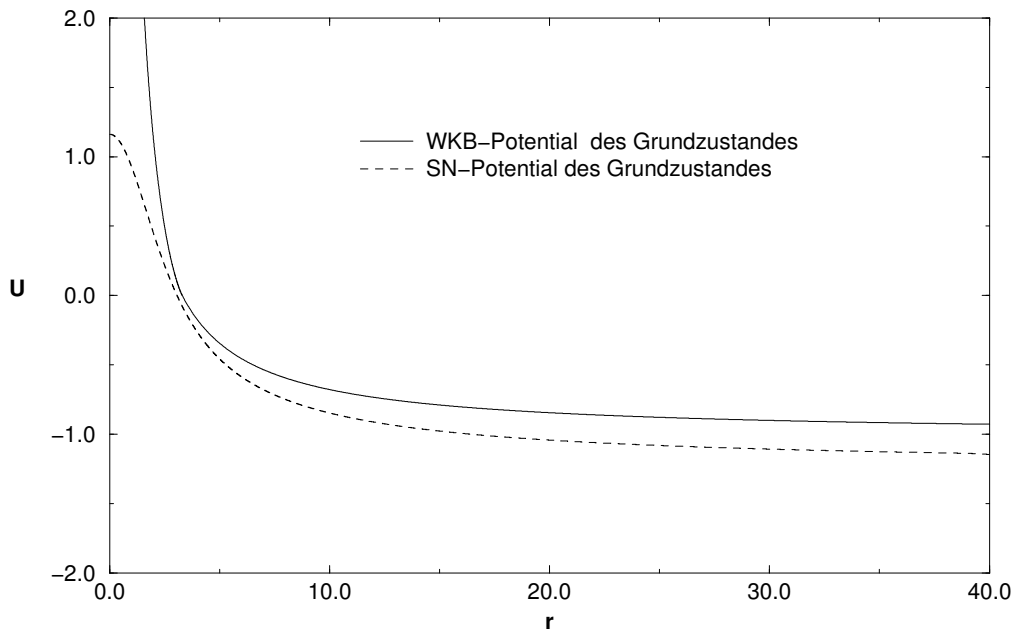


Abbildung 5.1: WKB-Potential und numerisches Potential zum Grundzustand. (Vergleiche die Abbildungen 3.4 und 3.6.)

Wie man sieht, ist  $\beta_{-1}$  positiv. In Abschnitt 5.1 wurde davon ausgegangen, daß  $U(r)$  bzw.  $x(t)$  monoton sind. In (5.17) wurde diese Annahme ausgenutzt, um die Funktion  $p(x) = \dot{x}(t(x))$  zu definieren, die auf Gleichung (5.19) führte. Da  $\beta_{-1} > 0$  ist, gibt es nun eine offene Umgebung um den Ursprung, in der  $U'(r)$  negativ ist. Ein Vergleich mit (5.7) zeigt, daß dann  $U'(r)$  stets kleiner 0 sein muß,

weil die rechte Seite der Gleichung immer negativ ist. Damit ist die Gültigkeit der Annahme bewiesen.

Es bezeichne nun  $\alpha_0$  den Parameter am Umkehrpunkt  $r_0 = u(\alpha_0)^2$ . Damit läßt sich die erste Anfangsbedingung  $U(r_0) = 0$  im klassisch erlaubten Bereich formulieren:

$$U(\alpha_0) = 0 \quad \Rightarrow \quad u'(\alpha_0) = 0, \quad (5.50)$$

$$r(\alpha_0) = r_0 \quad \Rightarrow \quad u(\alpha_0) = \sqrt{r_0}. \quad (5.51)$$

Der Parameter  $\alpha < 0$  läuft von  $\alpha_0$  bis zu  $\alpha_1$ , das durch die Bedingung  $r(\alpha_1) = 0$  festgelegt ist. In den Airy-Funktionen ausgedrückt, lautet schließlich die Lösung von (5.27)

$$\begin{aligned} u(\alpha) = \pi\sqrt{r_0} \operatorname{Bi}'((2C)^{-\frac{2}{3}}\alpha_0) \operatorname{Ai}((2C)^{-\frac{2}{3}}\alpha) \\ - \pi\sqrt{r_0} \operatorname{Ai}'((2C)^{-\frac{2}{3}}\alpha_0) \operatorname{Bi}((2C)^{-\frac{2}{3}}\alpha). \end{aligned} \quad (5.52)$$

Die zweite Anfangsbedingung  $U'(r_0) = U'_0$  wird durch die Wahl des  $\alpha_0$  festgelegt. Nach der Kettenregel gilt

$$\frac{dU}{d\alpha} = \frac{dr}{d\alpha} \frac{dU}{dr}. \quad (5.53)$$

Am Umkehrpunkt verschwindet nach (5.50) auch die Ableitung  $r'(\alpha)$ . Daher ist  $r(\alpha)$  an dieser Stelle nicht umkehrbar und  $U$  nicht differenzierbar. In dem offenen Intervall  $[\alpha_1, \alpha_0[$  läßt sich  $U'(r)$  jedoch angeben:

$$\frac{dU}{dr} = \frac{dU}{d\alpha} \left( \frac{dr}{d\alpha} \right)^{-1} = 4 \frac{u''(\alpha)u(\alpha) - u'(\alpha)^2}{u(\alpha)^4}. \quad (5.54)$$

Ersetzt man jetzt noch  $4u''(\alpha)$ , Gleichung (5.25) folgend, durch  $\alpha u(\alpha)$  und betrachtet den linksseitigen Limes  $r \rightarrow r_0$ , reduziert sich  $U'(r)$  auf die einfache Beziehung

$$\left. \frac{dU}{dr} \right|_{r \rightarrow r_0} = \frac{\alpha_0}{r_0}, \quad r < r_0, \quad (5.55)$$

die den Parameter  $\alpha_0$  in (5.52) festlegt und im übrigen der Definition (5.21) von  $\alpha$  entspricht. Letzteres wird sofort klar, wenn in (5.21) die Funktion  $P(s)$  an der Stelle  $s = 0$  gemäß Gleichung (5.14) durch  $\dot{x}(t) = e^t U'(r(t))$  ersetzt wird.

Anschließend muß noch der zweite Lösungsweig  $r > r_0$  durch geeignete Wahl der Parameter  $U_\infty$  und  $K_R$  glatt an den Umkehrpunkt angestückt werden. Abbildung 5.1 zeigt die WKB-Lösung des Potentials im gesamten Gebiet  $r > 0$ . Am Umkehrpunkt stellt der Computer den Graphen nur ungenau dar: Der Graph "knickt" dort etwas ab, was vermutlich darauf zurückzuführen ist, daß die parametrische Lösung  $U$  bei  $r_0$  nicht differenzierbar ist. Wie nach der Laurent-Entwicklung von  $U$  zu erwarten war, divergiert die Lösung am Ursprung. Durch

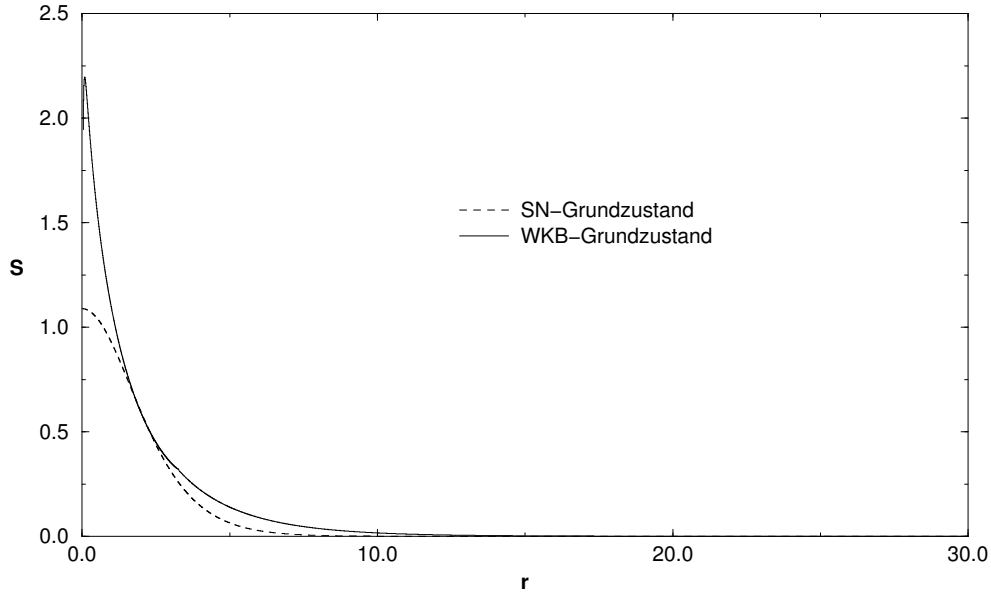


Abbildung 5.2: WKB-Wellenfunktion zum WKB-Potential in Abbildung 5.1. (Vergleiche Abbildung 3.4.)

Einsetzen der aneinander angepaßten Lösungszweige in die Airy-Näherung der allgemeinen WKB-Lösung (4.8) erhält man die zugehörigen Zweige der Wellenfunktion. In der parametrischen Form lautet die Lösung im klassisch erlaubten Bereich

$$\chi_+(\alpha) = C_1^- \left| \frac{\zeta(\alpha)}{U(\alpha)} \right|^{\frac{1}{4}} \text{Ai}(\zeta(\alpha)), \tag{5.56}$$

wobei  $\zeta(\alpha)$  nach Gleichung (4.18) durch

$$\zeta(\alpha)^{\frac{3}{2}} = 3 \int_{\alpha_0}^{\alpha} U(\alpha')^{\frac{1}{2}} u(\alpha') u'(\alpha') d\alpha' = 6 \int_{\alpha_0}^{\alpha} u'(\alpha')^2 d\alpha' \tag{5.57}$$

gegeben ist. Das Integral läßt sich analytisch lösen, so daß  $S(\alpha)$  explizit angegeben werden kann. Das führt nach einigen Zwischenschritten schließlich zu dem selbst in der kompaktesten Schreibweise immer noch reichlich unhandlichen Ausdruck

$$\begin{aligned} \zeta(\alpha)^{\frac{3}{2}} = & \gamma_0 + \gamma_{p,q} {}_pF_q \left( \{a\}_p, \{b\}_q; \frac{\alpha^3}{36} \right) \\ & + \sum_{i,j=1}^4 \gamma_{i,j} \frac{{}_0F_1 \left( b_i; \frac{\alpha^3}{36} \right) {}_0F_1 \left( b_j; \frac{\alpha^3}{36} \right)}{\Gamma(b_i) \Gamma(b_j)} \end{aligned} \tag{5.58}$$

mit den entsprechenden Parametern  $a$  und  $b$  und Koeffizienten  $\gamma$ . Die geschweiften Klammern um die Parameter symbolisieren  $p$ - bzw.  $q$ -Tupel von Koeffizienten. Die komplette Rechnung ist im Anhang aufgeführt. Analog gilt für das klassisch verbotene Gebiet

$$\zeta(r)^{\frac{3}{2}} = \frac{3}{2} e^{\pm \frac{3\pi i}{2}} \int_{r_0}^r \left| U_\infty + \frac{K_R}{r'} \right|^{\frac{1}{2}} dr' , \quad (5.59)$$

was mit ein paar Substitutionen auf

$$\begin{aligned} \zeta(r)^{\frac{3}{2}} = & -3K_R r \left| U_\infty + \frac{K_R}{r} \right|^{\frac{1}{2}} \\ & + \frac{3K_R^2}{2\sqrt{|U_\infty|}} \ln \left( 2r \left| U_\infty + \frac{K_R}{r} \right|^{\frac{1}{2}} - \frac{K_R}{\sqrt{|U_\infty|}} - 2\sqrt{U_\infty r} \right) \end{aligned} \quad (5.60)$$

führt. Der zugehörige Ausdruck für die Wellenfunktion ist

$$\chi_-(r) = C_0^- \left| \frac{\zeta(r)}{U_\infty + K_R r^{-1}} \right|^{\frac{1}{4}} \text{Ai}(\zeta(r)) . \quad (5.61)$$

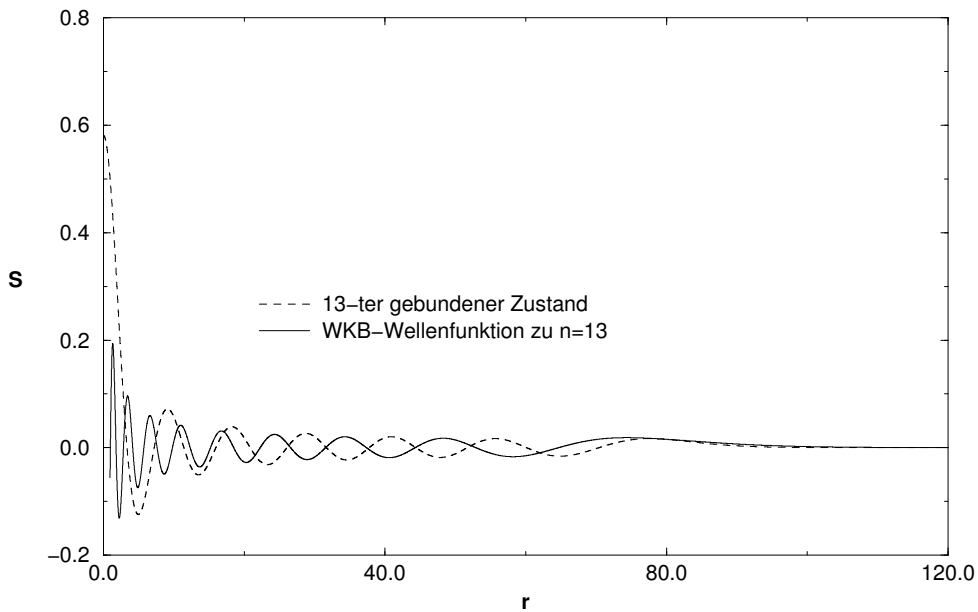


Abbildung 5.3: Vergleich von WKB-Wellenfunktion und numerischer Lösung der SNG zur Quantenzahl  $n = 13$ .

Einige WKB-Wellenfunktionen sind exemplarisch in den Abbildungen 5.2 bis 5.4 dargestellt. Zum Vergleich mit den numerischen Lösungen der SNG wurden die

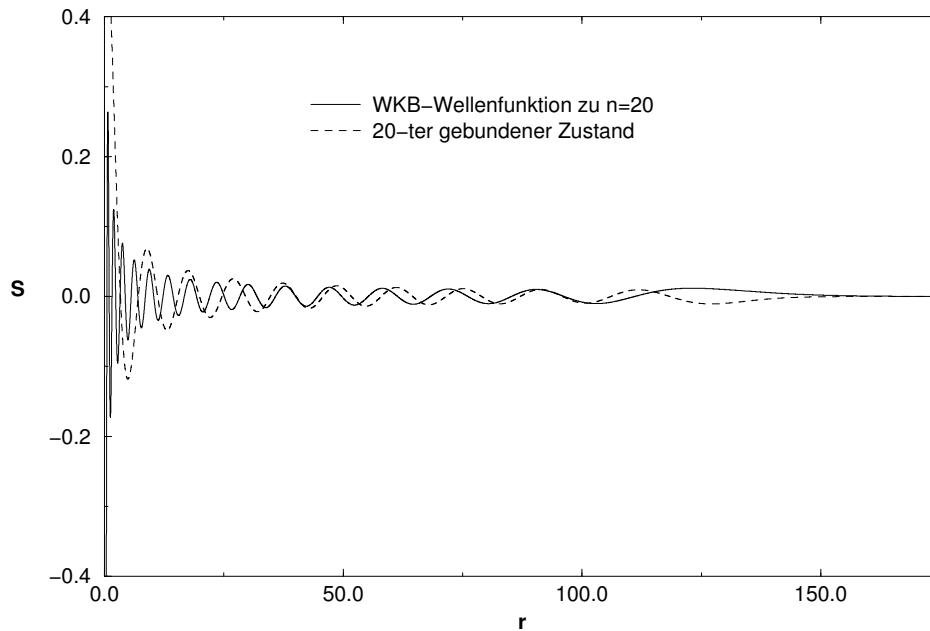


Abbildung 5.4: WKB-Wellenfunktion und numerische Lösung der SNG zur Quantenzahl  $n = 20$ .

WKB-Lösungen auf die SN-Lösungen normiert. Durch Umskalieren von  $U$  und Verschieben des Umkehrpunktes ist es möglich, Wellenfunktionen zu beliebigen Quantenzahlen  $n$  zu konstruieren. So wurde die Wellenfunktion in Abbildung 5.4 durch Umskalieren des Grundzustands aus Abbildung 5.2 erzeugt.

Wegen der Singularität von  $U$  am Ursprung divergieren dort die Wellenfunktionen. Zudem gilt der Knotensatz nicht mehr. Statt dessen hat jede Wellenfunktion unendlich viele Nullstellen, die sich in einer Umgebung des Ursprungs häufen.

Trotz qualitativer Ähnlichkeit stimmen offensichtlich WKB- und SN-Wellenfunktionen in ihren Phasen nicht überein. Dennoch ist das Gültigkeitskriterium (4.25) für die WKB-Näherung schon bei kleinen Quantenzahlen erfüllt, wie Abbildung 5.5 deutlich macht. Diese Diskrepanz muß jedoch nicht weiter verwundern: Schließlich wurde im WKB-Ansatz (5.3) für  $U$  der Phasenterm von  $S$  vernachlässigt. Möglicherweise paßt sich die Phase der WKB-Lösungen erst bei sehr viel größeren Quantenzahlen  $n$  der Phase der numerischen Lösung an. Dies ist zwar pure Spekulation, entspräche allerdings der ursprünglichen Motivation des WKB-Ansatzes. Wegen der instabilen numerischen Lösungen bei hohen Quantenzahlen, läßt sich diese These leider nicht überprüfen.

Um eine WKB-Wellenfunktion mit korrektem Phasenverhalten bei kleinen Quantenzahlen zu erhalten, müßte vermutlich der Ansatz (5.3) um einen Phasenterm erweitert werden. Ob die daraus hervorgehende WKB-Gleichung aber noch analytisch lösbar ist, bleibt fraglich.

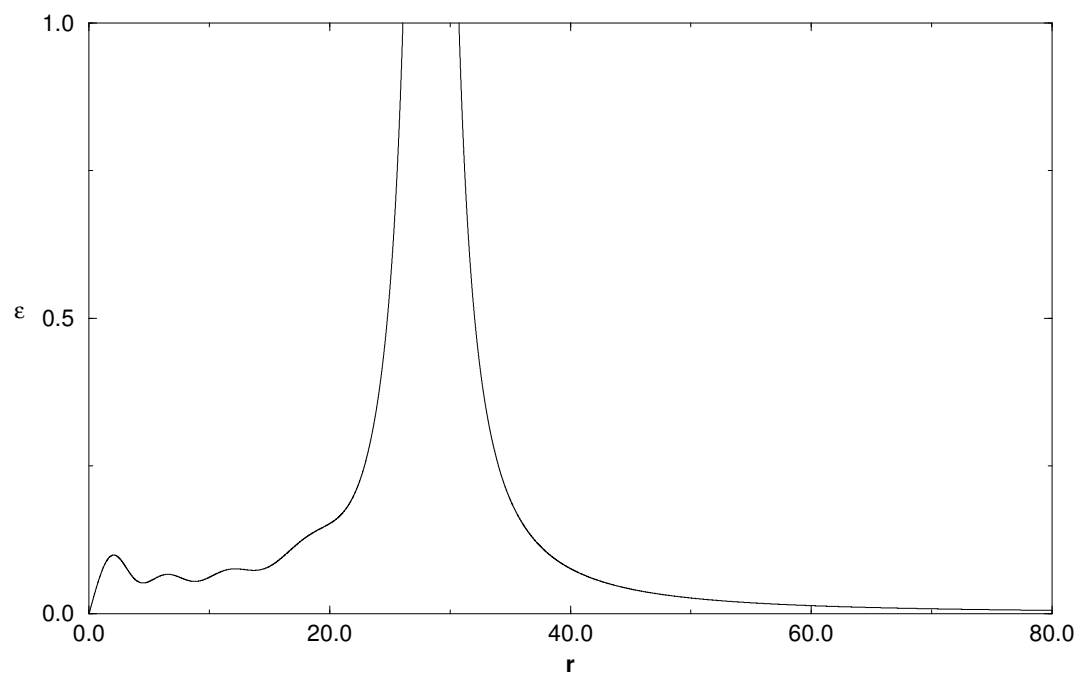


Abbildung 5.5: Gültigkeitskriterium (4.25) für den vierten gebundenen Zustand.

# Kapitel 6

## Asymptotik der Eigenwerte

Die numerische Behandlung der *Schrödinger-Newton-Gleichung* brachte ein Potenzgesetz für die  $n$ -Abhängigkeit der Eigenwerte hervor. Im Abschnitt 3.2.2 wurde bereits darauf hingewiesen, daß die Beziehung (3.20) auch aus der WKB-Näherung abgeleitet werden könne. Tatsächlich ist es möglich, aus der *Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsregel* zusammen mit den Skalierungseigenschaften der *WKB-Gleichung* im klassisch erlaubten Gebiet die asymptotische  $n$ -Abhängigkeit von  $E$  zu bestimmen.

### 6.1 Quantisierungsregel

Die Bohr-Sommerfeldsche Quantisierungsregel erlaubt, zu einer festen Quantenzahl  $n$  die möglichen Energieeigenwerte der gebundenen Zustände zu berechnen. Im Zusammenhang mit dem WKB-Verfahren wird auch häufig der Begriff *Phasenintegral-Quantisierung* verwendet. Dort taucht die Quantisierungsregel auf, wenn die Eindeutigkeit der WKB-Lösung im klassisch erlaubten Gebiet zwischen zwei Umkehrpunkten gefordert wird. Dies soll jedoch an dieser Stelle nicht näher erläutert werden.

Anschaulich betrachtet, beschreibt die Quantisierungsregel, wieviele Zustände  $n(E)$  zu einer vorgegebenen Energie  $E$  in eine "Zustands-Kugel" vom Radius  $r_0$  passen. Um in der quantenmechanischen Terminologie zu bleiben, bezeichne nun die Funktion  $s(z)$  in (4.8) eine Wellenfunktion. Damit ist die Wellenfunktion auf  $\mathbb{C} \setminus \{z_0\}$  analytisch. Ferner werde angenommen, daß die Zahl ihrer Nullstellen der Anzahl der gebundenen Zustände bis zum Energieeigenwert  $E$  entspreche (Knotensatz). Ein möglicher Ansatz zur Herleitung der Quantisierungsregel findet sich in [30]. Die Idee ist, die Anzahl  $n$  der Nullstellen direkt aus  $s$  zu berechnen:

Es sei also  $s(z_i) = 0$ , wobei der Index  $i \in \{1, 2, 3, 4, 5, \dots, n\} \subset \mathbb{N}$  stets größer als 0 ist. Nach wie vor bezeichne  $z_0$  den Umkehrpunkt von  $f$  mit  $f(z_0) = 0$ . An dieser Stelle ist die WKB-Lösung  $s$  singular. Für unsere Zwecke stelle man sich vor, daß  $s$  invariant unter  $z \mapsto -z$  ist, so daß  $-z_0$  ein zweiter, symmetrisch zu  $z_0$

liegender Umkehrpunkt ist. Die Nullstellen liegen demnach symmetrisch um den Ursprung verteilt. In der Nähe einer Nullstelle  $z_i$  läßt sich  $s$  in eine Potenzreihe bis zur ersten Ordnung entwickeln:

$$s(z - z_i) = s_1(z - z_i) + \mathcal{O}(|z - z_i|^2). \quad (6.1)$$

Der Quotient  $q(z) = s'(z)s(z)^{-1}$  entspricht dann seiner eigenen Laurent-Entwicklung bis  $(z - z_i)^{-1}$ , das bedeutet

$$q(z) = (z - z_i)^{-1}. \quad (6.2)$$

Danach hat  $q$  an Stelle  $z_i$  einen Pol mit Residuum 1. Integriert man  $q$  über eine geschlossene Kurve  $\mathcal{C}_i$ , die je eine Nullstelle  $z_i$  von  $s$  umschließt, ergibt sich nach dem Residuensatz

$$n = \sum_i \text{Res}(s, z_i) = \sum_i \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}_i} q(z) dz. \quad (6.3)$$

Es sei  $\mathcal{C}$  eine Kurve, die sämtliche Nullstellen einschließt sowie die beiden Umkehrpunkte  $z_0$  und  $-z_0$  enthält. Innerhalb von  $\mathcal{C}$  gilt also  $f < 0$ . Umgeformt ergibt das Integral aus (6.3)

$$\oint_{\mathcal{C}} q(z) dz = \oint_{\mathcal{C}} \frac{d}{dz} \ln |s(z)| dz. \quad (6.4)$$

Setzt man jetzt die WKB-Näherung für  $s$  ein und wählt ohne Einschränkung der Allgemeinheit die partikuläre Lösung in (4.8), die durch das Pluszeichen gegeben ist, erhält man

$$\frac{d}{dz} \ln |s(z)| = -\frac{1}{4} \frac{f'(z)}{f(z)} + f(z)^{\frac{1}{2}}. \quad (6.5)$$

Der erste Summand  $\tilde{q} = f'f^{-1}$  läßt sich wieder leicht integrieren. Die Vorgehensweise ist bereits klar: Entwicklung von  $f$  in der Umgebung des Umkehrpunktes  $z_0$  und Integration über eine geschlossene Kurve  $\mathcal{C}_0^+$  um  $z_0$ . Berücksichtigt man auch den zweiten Umkehrpunkt  $-z_0$ , folgt nach dem Residuensatz

$$2 = \text{Res}(q, z_0) + \text{Res}(q, -z_0) = \sum_{\pm} \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}_0^{\pm}} q(z) dz. \quad (6.6)$$

Aus den letzten vier Gleichungen erhält man nun unmittelbar die Bohr-Sommerfeldsche Quantisierungsregel

$$2\pi \left( n + \frac{1}{2} \right) = \oint_{\mathcal{C}} |f(z)|^{\frac{1}{2}} dz, \quad f < 0. \quad (6.7)$$



Das Ergebnis läßt sich ohne weiteres auf die Lösung der *WKB-Gleichung* (5.5) mit nur einem Umkehrpunkt  $r_0$  übertragen, wobei die Singularität von  $U$  am Ursprung berücksichtigt werden muß: Der Quotient  $\tilde{q} = U'U^{-1}$  hat nach Gleichung (5.49) dort einen Pol mit Residuum -1. Es sei also  $U(r)$  Lösung der *WKB-Gleichung* im klassisch erlaubten Gebiet. Anstatt die Integration von  $-r_0$  bis  $r_0$  durchzuführen, kann aus Gründen der Symmetrie ebensogut von 0 bis  $r_0$  integriert werden und die linke Seite von (6.7) durch 2 geteilt werden. Berücksichtigt werden muß dabei allerdings, daß die Anzahl der Nullstellen in  $] -r_0, r_0[$  dann  $2n$  beträgt. Damit hat man

$$2\pi \left( n + \frac{1}{8} \right) = \int_0^{r_0} U(r)^{\frac{1}{2}} dr . \quad (6.8)$$

## 6.2 Skalierungsverhalten des Phasenintegrals

Aufgrund der bei der Herleitung des Phasenintegrals gemachten WKB-Näherung ist die Formel (6.8) nur für große Quantenzahlen  $n$  gültig, so daß der Summand  $\frac{\pi}{4}$  vernachlässigt werden kann. Es ist nun zu untersuchen, wie sich das Phasenintegral unter Umskalierung von  $U$  verhält. Nach (5.12) ist das WKB-Potential  $U$  invariant unter Dilatationen

$$U(r) \mapsto U(\mu r) . \quad (6.9)$$

Man betrachte zunächst  $U$  am Umkehrpunkt  $r_0$ . Die Nullstelle des skalierten Potentials  $\tilde{U}$  werde mit  $\tilde{r}_0$  bezeichnet. Dann gilt

$$0 = \tilde{U}(\tilde{r}_0) = (\Gamma \circ U)(\tilde{r}_0) = U(\mu\tilde{r}_0) = 0 . \quad (6.10)$$

Folglich transformiert sich der Umkehrpunkt gemäß  $r_0 \mapsto \mu^{-1}r_0 = \tilde{r}_0$ , was zu erwarten war. Es bezeichne nun  $P(r_0)$  das Phasenintegral. Unter der Skalierung  $\Gamma : r \mapsto \mu^{-1}r$  verhält sich  $P(r_0)$  dann wie

$$\begin{aligned} \tilde{P}(\tilde{r}_0) &= (\Gamma \circ P)(\tilde{r}_0) = \int_0^{\tilde{r}_0} \tilde{U}(r)^{\frac{1}{2}} dr = \int_0^{\tilde{r}_0} U(\mu r)^{\frac{1}{2}} dr \\ &= \mu^{-1} \int_0^{\mu\tilde{r}_0} U(\rho)^{\frac{1}{2}} d\rho = \mu^{-1} P(r_0) , \end{aligned} \quad (6.11)$$

wobei  $\rho = \mu r$  substituiert wurde. In gleicher Weise skaliert sich formal das  $n$ , das heißt  $n \mapsto \mu^{-1}n =: \tilde{n}$ . Anschaulich kann man sich  $\tilde{n} - 1$  als Anzahl der Nullstellen der Wellenfunktion  $\tilde{S}$  als Lösung der *Schrödinger-Newton-Gleichung* zu einem gegebenen  $\tilde{U}$  vorstellen, sofern  $\tilde{n}$  ganzzahlig ist. Das erklärt auch den aus der numerischen Untersuchung der SNG gewonnenen Eindruck, daß sich die Potentiale zu den höheren Eigenzuständen nur noch durch Streckungen des Arguments voneinander zu unterscheiden scheinen.

### 6.3 Skalierungsverhalten der Eigenwerte

Zu untersuchen ist noch, wie sich der (normierte) Eigenwert  $E$  unter  $\Gamma$  transformiert. In Abschnitt 2.3 wurde der Eigenwert durch die Koeffizienten der asymptotischen Form des SNG-Potentials ausgedrückt:

$$E = \frac{A}{2B^2}. \quad (6.12)$$

In den Koeffizienten  $A$  und  $B$  ausgedrückt, lautet die asymptotische Form des Potentials  $U = A + Br^{-1}$ . Dies entspricht im übrigen der WKB-Lösung des Potentials im klassisch verbotenen Bereich mit  $K_R = B$ . Der Unterschied besteht lediglich darin, daß die WKB-Wellenfunktion im allgemeinen nicht mittels Division durch  $K_R^2$  normiert werden kann, da sich  $K_R$  nicht durch das Normierungsintegral  $I$  ausdrücken läßt.

Nimmt man nun an, daß die asymptotische Form für  $U$  in der Nähe des Umkehrpunktes das tatsächliche Potential hinreichend genau approximiert, so kann der Eigenwert als Funktion von  $U'(r)$  und  $r$  geschrieben werden. Es gilt somit

$$U(r_0) = A + \frac{B}{r_0} = 0 \quad \Rightarrow \quad r_0 = -\frac{B}{A} \quad (6.13)$$

sowie

$$U'(r_0) = -\frac{B}{r_0^2} = -\frac{A^2}{B}. \quad (6.14)$$

Durch den Vergleich mit (6.12) erhält man für  $E$

$$E = \frac{1}{2} \frac{1}{r_0^3 U'(r_0)}. \quad (6.15)$$

Aus Gleichung (6.10) ist bereits bekannt, wie sich der Umkehrpunkt unter der Skalierung  $\Gamma$  verhält. An der Stelle  $\tilde{r}_0$  ist die Ableitung  $\tilde{U}'(r)$

$$\left. \frac{d}{dr} \tilde{U}(r) \right|_{r=\tilde{r}_0} = \left. \frac{d}{dr} (\Gamma \circ U)(r) \right|_{r=\tilde{r}_0} = \mu U'(\mu \tilde{r}_0) = \mu U'(r_0). \quad (6.16)$$

Die Skalierung des Eigenwerts  $E \mapsto \tilde{E}$  erhält man jetzt durch Einsetzen von (6.16) und (6.10) in (6.15):

$$\tilde{E} = \frac{1}{2} \frac{1}{\tilde{r}_0^3 \tilde{U}'(\tilde{r}_0)} = \frac{1}{2} \frac{\mu^2}{r_0^3 U'(r_0)} = \mu^2 E. \quad (6.17)$$

Der transformierte Eigenwert ist gerade der Eigenwert, der zu der  $\tilde{n}$ -ten Eigenlösung  $\tilde{S}$  gehört, die wiederum aus dem umskalierten WKB-Potential  $\tilde{U}$  gewonnen wurde. Es sei also  $E_n$  ein Eigenwert zu einer festen, hinreichend großen

Quantenzahl  $n \in \mathbb{N}$ . Nach (6.11) und (6.17) gilt dann für jedes ganzzahlige  $\tilde{n} > n$  folgende Beziehung

$$\frac{\tilde{E}_{\tilde{n}}}{E_n} = \left(\frac{n}{\tilde{n}}\right)^2 \Rightarrow \tilde{E} \propto \tilde{n}^{-2}. \quad (6.18)$$

Es ist einsichtig, daß das Skalierungsverhalten von  $U$  und damit das von  $P$  oder  $E$  unabhängig von der Ordnung ist, bis zu der die asymptotische Form von  $U$  oder die WKB-Lösung entwickelt wird. Alle Summanden einer Potenzreihenentwicklung müssen schließlich das gleiche Skalierungsverhalten haben – das der Funktion selbst nämlich. Ein Vergleich mit den numerischen Ergebnissen aus Abschnitt 3.5 legt nahe, daß sich mit dem asymptotischen Gesetz (6.18) beliebige Eigenwerte ab etwa  $n = 20$  berechnen lassen – vorausgesetzt, daß der zwanzigste Eigenwert hinreichend genau bestimmt wurde.

# Kapitel 7

## Zusammenfassung

Faßt man die Reduktion der Wellenfunktion als einen physikalischen Vorgang auf, liegt es nahe, den Einfluß der Gravitation näher zu beleuchten. Der übliche Ansatz ist, das Gravitationsfeld dabei als semi-quantisiert anzunehmen. Als Alternative dazu wird, einer Idee von Penrose folgend, in der vorliegenden Arbeit eine Modifikation der Ein-Teilchen-Schrödinger-Gleichung mit vollständig klassischem Gravitationspotential untersucht.

Die *Schrödinger-Newton-Gleichung* (SNG) beschreibt ein Teilchen, das sich in seinem eigenen Gravitationsfeld bewegt (*Eigengravitation*). Das Gravitationsfeld wird als Lösung der Newtonschen Feldgleichung angenommen, wobei die Massendichte durch die Wahrscheinlichkeitsdichte des Teilchens gegeben ist. Für die SNG existiert eine Klasse gebundener, normierbarer Zustände mit eindeutigen Grundzustand. Die Eindeutigkeit der höheren gebundenen Zustände erscheint im Hinblick auf die numerischen Ergebnisse ebenso evident. Ferner gilt eine Art Knotensatz: Die Zustände lassen sich derart numerieren, daß der  $n$ -te Zustand gerade  $n - 1$  Nullstellen hat.

Da das Richtungsfeld der SNG invariant unter einer 1-parametrischen Symmetriegruppe von Skalierungstransformationen ist, kann nach Arnold die Ordnung der Differentialgleichung um 1 erniedrigt werden. Das führt auf ein System autonomer Differentialgleichungen, das sich leichter numerisch integrieren läßt als das ursprüngliche System der SNG. Ähnlich wie beim Wasserstoff-Atom existiert ein Potenzgesetz für die  $n$ -Abhängigkeit der Eigenwerte, jedoch mit dem abweichenden Exponenten 2.1. Für die Eigenwerte läßt sich eine Fehlerabschätzung angeben. Daraus geht hervor, daß das Integrationsverfahren nur etwa bis zum zwanzigsten Zustand hinreichend genaue Ergebnisse liefert.

Um eine asymptotische Form des Gravitationspotentials für große Quantenzahlen  $n$  sowie eine asymptotische  $n$ -Abhängigkeit der Eigenwerte zu finden, wird eine Quasi-WKB-Näherung für die SNG entwickelt. Das führt auf zwei nicht-lineare Differentialgleichungen für das Gravitationspotential im *klassisch erlaubten* bzw. *klassisch verbotenen Bereich*. Mit einer Näherung des Ansatzes für den klassisch verbotenen Bereich, können beide Gleichungen explizit gelöst werden, wobei die

Lösung des klassisch erlaubten Bereichs am Ursprung divergiert. Die Lösungen sind dilatationsinvariant und lassen sich stetig und differenzierbar aneinander anpassen.

Aus dem WKB-Potential kann schließlich eine WKB-Approximation der Wellenfunktion für den gesamten Definitionsbereich berechnet werden, so daß sich jedem  $n$ -ten Zustand eindeutig ein WKB-Zustand zuordnen läßt. Die unterschiedlichen Wellenfunktionen gehen durch Umskalieren (Dilatation des WKB-Potentials) auseinander hervor. Wegen der Divergenz des Potentials gilt jedoch der Knotensatz nicht mehr. Vielmehr hat jede Wellenfunktion unendlich viele Nullstellen, die sich in einer Umgebung des Ursprungs häufen. Das Phasenverhalten der numerischen Lösung gibt die WKB-Wellenfunktion nicht wieder.

Für das Phasenintegral des WKB-Potentials gilt in Analogie zur *Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsregel* eine modifizierte Quantisierungsregel. Bei großen Quantenzahlen ist das Phasenintegral ungefähr proportional zu  $n$ . Da sich Eigenwerte und Phasenintegral unter Umskalierung des WKB-Potentials unterschiedlich verhalten, kann daraus die  $n$ -Abhängigkeit der Eigenwerte  $E$  bestimmt werden. Das führt in Übereinstimmung mit den numerischen Ergebnissen auf die asymptotisch gültige Beziehung  $E \propto n^{-2}$ .

Bislang fehlt eine verallgemeinerte WKB-Theorie, die sich auf die *Schrödinger-Newton-Gleichung* exakt anwenden läßt. Die Entwicklung einer Theorie ist jedoch eine mögliche Aufgabe für die Zukunft. Ebenso ist die Ausdehnung der Untersuchungen auf nicht-rotationssymmetrische sowie nicht-stationäre Lösungen anzustreben. Im Falle nicht-stationärer Lösungen ist es sicherlich zunächst ausreichend, eine Superposition zweier stationärer Lösungen zu betrachten. Ferner wären weitere Modellierungen der der Reduktion der Wellenfunktion zugrundeliegenden physikalischen Mechanismen zu begrüßen.

# Anhang A

## Tabelle der Eigenwerte

<i>n</i> -ter Zustand	Eigenwert $E_n$
1	-0.040693±0.00007
2	-0.00769934±0.00000008
3	-0.00313162± 0.00002
4	-0.00168689±0.000007
5	-0.00105229±0.0000004
6	-0.000718492±0.0001
7	-0.000521568±0.00002
8	-0.000395759±0.00004
9	-0.000310533±0.000001
10	-0.000250149±0.0001
11	-0.000205794±0.000003
12	-0.000172274±0.000007
13	-0.000146317±0.0001
14	-0.000125825±0.0001
15	-0.000109345±0.0001
16	-0.0000959092±0.00004
17	-0.0000848061±0.00002
18	-0.0000755083±0.00002
19	-0.0000676649±0.00003

# Anhang B

## Integrale des WKB-Potentials

### B.1 Klassisch erlaubtes Gebiet

Um das Integral aus (5.57)

$$\zeta(\alpha)^{\frac{3}{2}} = 6 \int_{\alpha_0}^{\alpha} u'(\alpha')^2 d\alpha' \quad (\text{B.1})$$

zu lösen, bietet sich zunächst an,  $u'$  gemäß (4.15) und (4.16) durch die Bessel-Funktionen  $I_{\pm\nu}(\alpha)$  auszudrücken. Nach [25] gilt

$$I'_{\pm\nu}(\alpha) = \frac{1}{2} (I_{\pm\nu-1}(\alpha) + I_{\pm\nu+1}(\alpha)) . \quad (\text{B.2})$$

Nutzt man diese Beziehung aus und vereinfacht den Ausdruck, der durch das Ableiten von (5.52) entsteht, bekommt man

$$u'(\alpha) = \frac{\alpha}{2 \cdot 2^{\frac{1}{6}} \sqrt{3}} \left( k_2 I_{-\frac{2}{3}} \left( \frac{1}{3} \alpha^{\frac{3}{2}} \right) + k_2 I_{\frac{2}{3}} \left( \frac{1}{3} \alpha^{\frac{3}{2}} \right) - k_1 K_{\frac{2}{3}} \left( \frac{1}{3} \alpha^{\frac{3}{2}} \right) \right) , \quad (\text{B.3})$$

wobei  $k_i$  abkürzend für die Koeffizienten aus (5.52)

$$\begin{aligned} k_1 &= \pi \sqrt{r_0} \text{Bi}'((2C)^{-\frac{2}{3}} \alpha_0) , \\ k_2 &= -\pi \sqrt{r_0} \text{Ai}'((2C)^{-\frac{2}{3}} \alpha_0) \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

steht und  $K_{\pm\nu}$  mit  $I_{\pm\nu}$  das Fundamentalsystem von (4.14) bildet. Multipliziert man den Integranden in (B.1) aus, lassen sich immer jeweils 2 Faktoren zu *Hypergeometrischen Funktionen*  ${}_2F_1(a, b; \alpha)$  zusammenfassen [28]. Substituiert man noch das Argument gemäß  $d\alpha = \sqrt{\alpha} d\vartheta$ , läßt sich das Integral mit dem Computer oder anhand von Tabellen spezieller Funktionen lösen [21, 25, 28].

Das führt nach wenigen Zwischenschritten und Rücksubstitution trotz anschließender Vereinfachung zu dem immer noch etwas unschönen Ausdruck

$$\begin{aligned}
 \zeta(\alpha)^{\frac{3}{2}} &= \frac{\alpha_0^2 r_0}{6} {}_0F_1\left(\frac{1}{3}; \frac{\alpha_0^3}{36}\right) {}_0F_1\left(\frac{5}{3}; \frac{\alpha_0^3}{36}\right) \\
 &- \frac{\alpha_0^2 r_0}{6} {}_0F_1\left(\frac{1}{3}; \frac{\alpha_0^3}{36}\right) {}_0F_1\left(\frac{5}{3}; \frac{\alpha_0^3}{36}\right) {}_pF_q\left(\left\{-\frac{1}{2}\right\}, \left\{-\frac{2}{3}, \frac{2}{3}\right\}; \frac{\alpha^3}{36}\right) \\
 &+ \frac{\alpha_0^4 r_0 \pi^2 \alpha}{162} \frac{{}_0F_1\left(\frac{5}{3}; \frac{\alpha_0^3}{36}\right)^2 {}_0F_1\left(\frac{1}{3}; \frac{\alpha^3}{36}\right)^2}{\Gamma\left(\frac{5}{3}\right)^2 \Gamma\left(\frac{1}{3}\right)^2} \\
 &- \frac{\alpha_0^4 r_0 \pi^2 \alpha}{162} \frac{{}_0F_1\left(\frac{5}{3}; \frac{\alpha_0^3}{36}\right)^2 {}_0F_1\left(-\frac{2}{3}; \frac{\alpha^3}{36}\right) {}_0F_1\left(\frac{4}{3}; \frac{\alpha^3}{36}\right)}{\Gamma\left(\frac{5}{3}\right)^2 \Gamma\left(-\frac{2}{3}\right) \Gamma\left(\frac{4}{3}\right)} \\
 &+ \frac{r_0 \pi^2 \alpha^5}{162} \frac{{}_0F_1\left(\frac{1}{3}; \frac{\alpha_0^3}{36}\right)^2 {}_0F_1\left(\frac{5}{3}; \frac{\alpha^3}{36}\right)^2}{\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)^2 \Gamma\left(\frac{5}{3}\right)^2} \\
 &- \frac{r_0 \pi^2 \alpha^5}{162} \frac{{}_0F_1\left(\frac{1}{3}; \frac{\alpha_0^3}{36}\right)^2 {}_0F_1\left(\frac{2}{3}; \frac{\alpha^3}{36}\right) {}_0F_1\left(\frac{8}{3}; \frac{\alpha^3}{36}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)^2 \Gamma\left(\frac{2}{3}\right) \Gamma\left(\frac{8}{3}\right)}.
 \end{aligned} \tag{B.5}$$

Obwohl die implizite Integraldarstellung (5.57) bzw. (B.1) von  $\zeta(\alpha)$  um einiges platzsparender ist, hat die explizite Form hier den Vorteil, daß sie numerische Operationen sowie graphische Darstellungen mit dem Computer wesentlich beschleunigt.

## B.2 Klassisch verbotenes Gebiet

Für das klassisch verbotene Gebiet gilt

$$\zeta(r)^{\frac{3}{2}} = \frac{3}{2} e^{\pm \frac{3\pi i}{2}} \int_{r_0}^r \left| U_\infty + \frac{K_R}{r'} \right|^{\frac{1}{2}} dr'. \tag{B.6}$$

Das Integral läßt sich zu

$$\int_{r_0}^r \left| U_\infty + \frac{K_R}{r'} \right|^{\frac{1}{2}} dr' = -i \int_{r_0}^r \left( \frac{U_\infty r' + K_R}{r'} \right)^{\frac{1}{2}} dr' \tag{B.7}$$

umschreiben. Substitution des Integranden führt dann auf

$$\zeta(v)^{\frac{3}{2}} = -3K_R \int_{v_0}^v \frac{v'^2}{(v'^2 - U_\infty)^2} dv', \quad v = \left( \frac{U_\infty r + K_R}{r} \right)^{\frac{1}{2}}. \tag{B.8}$$



Als weiterer Schritt empfiehlt sich nun die Substitution durch Trigometrische oder Hyperbolische Funktionen – also beispielsweise  $v = \sqrt{A} \cosh t$ . Zweifache partielle Integration und Rücksubstitution ergeben schließlich

$$\begin{aligned} \zeta(r)^{\frac{3}{2}} &= -3K_R r \left| U_\infty + \frac{K_R}{r} \right|^{\frac{1}{2}} \\ &+ \frac{3K_R^2}{2\sqrt{|U_\infty|}} \ln \left( 2r \left| U_\infty + \frac{K_R}{r} \right|^{\frac{1}{2}} - \frac{K_R}{\sqrt{|U_\infty|}} - 2\sqrt{U_\infty r} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

# Literaturverzeichnis

- [1] N. Rosen A. Einstein, B. Podolsky. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Physical Review*, 47:777–780, 1935.
- [2] V.F. Zaitsev A.D. Polyenin. *Exact Solutions for Ordinary Differential Equations*. CRC Press, Boca Raton, 1995.
- [3] H. Amann. *Ordinary Differential Equations*. Walter de Gruyter, Berlin, 1990.
- [4] V.I. Arnold. *Geometrical Methods in the Theory of Ordinary Differential Equations*. Springer Verlag, New York, 1983.
- [5] M.S. Berger. *Nonlinearity and Functional Analysis*. Academic Press Inc., New York, 1977.
- [6] C.J. Joachain B.H. Brandesen. *Introduction to Quantum Mechanics*. John Wiley & Sons Inc., New York, 1989.
- [7] D. Bohm. A suggested interpretation of the quantum theory in terms of "hidden variables". *Physical Review*, 85:166–193, 1952.
- [8] L. de Broglie. *La Theorie de la Mesure en Mécanique Ondulatoire*. Gauthier-Villars, Paris, 1957.
- [9] L. Diósi. Gravity and quantum-mechanical localizations of macro-objects. *Physical Letters A*, 105(4/5):199–202, 1984.
- [10] L. Diósi. A universal master equation for the gravitational violation of quantum mechanics. *Physical Letters A*, 120(8):377–381, 1987.
- [11] L. Diósi. Models for universal reduction of macroscopic quantum fluctuations. *Physical Review A*, 40(3):1165–1174, 1989.
- [12] L. Diósi. Coherent states and the measurement problem. *quant-ph/9610037*, 1996.
- [13] L. Diósi. Coupling classical and quantum variables using continuous quantum measurement theory. *quant-ph/9705008*, 1997.

- [14] P. Dirac. *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford University Press, London, 1958.
- [15] R. Busam E. Freitag. *Funktionentheorie*. Springer Verlag, Berlin, 1995.
- [16] B. Lukács F. Károlyházy, A. Frenkel. On the possible role of gravity in the reduction of the wave function. In C.J. Isham R. Penrose, editor, *Quantum Concepts in Space and Time*, pages 109–128. Oxford University Press, Oxford, 1986.
- [17] M.V. Fedoryuk. *Asymptotic Analysis*. Springer-Verlag, Berlin, 1993.
- [18] A. Rimini G. Ghirardi, R. Grassi. Continuous-spontaneous-reduction model involving gravity. *Physical Review A*, 42(3):1057–1064, 1990.
- [19] P. Tod I.M. Moroz. An analytical approach to the Schrödinger-Newton equations. *Nonlinearity*, 12:201–216, 1999.
- [20] P. Tod I.M. Moroz, R. Penrose. Spherically-symmetric solutions of the Schrödinger-Newton equations. *Classical and Quantum Gravity*, 15:2733–2742, 1998.
- [21] K.A. Semendjajew I.N. Bronstein. *Taschenbuch der Mathematik*. B.G Teubner Stuttgart, 1991.
- [22] R. Lipsman K. Coombes, B. Hunt. *Differential Equations with Mathematica*. John Wiley & Sons Inc., 1995.
- [23] F. Károlyházy. Gravitation and quantum mechanics of macroscopic objects. *Il Nuovo Cimento A*, 26:1506–1518, 1965.
- [24] R.E. Langer. On the connection formulas and the solution of the wave equation. *Physical Review*, 51:669–676, 1937.
- [25] N. Lebedew. *Spezielle Funktionen und ihre Anwendung*. BI Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1973.
- [26] S. Lie. *Theorie der Transformationsgruppen*. B.G. Teubner, Leipzig, 1888.
- [27] E.H. Lieb. Existence and uniqueness of the minimizing solution of Choquard's nonlinear equation. *Studies in Applied Mathematics*, 57:93–105, 1977.
- [28] Y.L Luke. *The Special Functions and their Approximations*. Academic Press, New York, 1969.
- [29] R. Maeder. *Programming in Mathematica*. Addison-Wesley Publishing, 1990.

- [30] H. Mitter. *Quantentheorie*. BI Wissenschaftsverlag Mannheim, 1969.
- [31] P. O. Fröman N. Fröman. *JWKB Approximation*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1965.
- [32] W. Nolting. *Quantenmechanik Teil 1+2*. Verlag Zimmermann-Neufang, 1993.
- [33] F.W. Olver. *Asymptotics and Special Functions*. Academic Press Inc., New York, 1974.
- [34] P. Mittelstaedt P. Busch, P.J. Lahti. *The Quantum Theory of Measurement*. Springer Verlag, Berlin, 1991.
- [35] P. Pearle. Models for reduction. In C.J. Isham R. Penrose, editor, *Quantum Concepts in Space and Time*, pages 84–108. Oxford University Press, Oxford, 1986.
- [36] R. Penrose. Gravity and state vector reduction. In C.J. Isham R. Penrose, editor, *Quantum Concepts in Space and Time*, pages 129–146. Oxford University Press, Oxford, 1986.
- [37] R. Penrose. *Shadows of the Mind*. Oxford University Press, Oxford, 1994.
- [38] R. Penrose. On gravity's role in quantum state reduction. *General Relativity and Gravitation*, 28(5):581–600, 1996.
- [39] R. Penrose. Quantum computation, entanglement and state reduction. *Philosophical Transactions A*, 356:1927–1939, 1998.
- [40] C.J. Isham R. Penrose, editor. *Quantum Concepts in Space and Time*. Oxford University Press, Oxford, 1986.
- [41] L. Schiff. *Quantum Mechanics*. Mc Graw-Hill Inc., 1968.
- [42] H.-J. Schmidt. Is there a gravitational collapse of the wave-packet? In *New Insights in Quantum Mechanics*. World Scientific, 1999 (noch nicht erschienen).
- [43] E. Schrödinger. Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik. *Die Naturwissenschaften*, 23:807–812, 1935.
- [44] F. Schwabl. *Quantenmechanik*. Springer Verlag, Berlin, 1990.
- [45] J. von Neumann. *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*. Princeton University Press, Princeton, 1955.

- [46] R.C. Di Prima W.E. Boyce. *Elementary Differential Equations*. John Wiley & Sons Inc., New York, 1977.
- [47] H. Wimmel. *Quantum Physics and Observed Reality*. World Scientific, Singapur, 1992.



# Danksagung

Diese Diplomarbeit ist in der Arbeitsgruppe *Makroskopische Systeme und Quantentheorie* des Fachbereichs Physik der Universität Osnabrück entstanden.

Mein Interesse an den konzeptionellen Problemen der Quantenmechanik wurde bereits im Sommersemester 1997 geweckt. Damals bereitete ich einen Seminarvortrag über ein neues EPR-Experiment zum Test der Bellschen Ungleichungen vor. Prof. Dr. Heinz-Jürgen Schmidt betreute dieses Projekt.

Dankenswerterweise erklärte sich Prof. Dr. Heinz-Jürgen Schmidt Weise auch dazu bereit, die Betreuung meiner Diplomarbeit zu übernehmen. Er stand mir jederzeit mit gutem Rat zur Seite. Seine kritischen Anmerkungen und Ideen haben wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen. Dr. Jürgen Schnack danke ich für die kritische Durchsicht der Arbeit. Zudem war er stets hilfsbereit, wenn es galt, Probleme computerbezogener Art zu bewältigen. Der unermüdliche Einsatz von Jens Nie bei der Einrichtung meines Computerarbeitsplatzes hat mir das Rechnen und Tippen vielfach erleichtert.

Der ganzen Arbeitsgruppe bin ich für manch wertvollen Hinweis verpflichtet, der die Arbeit vorangebracht hat.

## Erklärung

Hiermit erkläre ich, die vorliegende Arbeit selbständig und nur mit den aufgeführten Hilfsmitteln verfaßt zu haben.

Osnabrück, im Oktober 1999

— Carsten Hartmann —