



KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH
GESELLSCHAFT MIT BESCHRÄNKTER HAFTUNG
Institut für Festkörperforschung

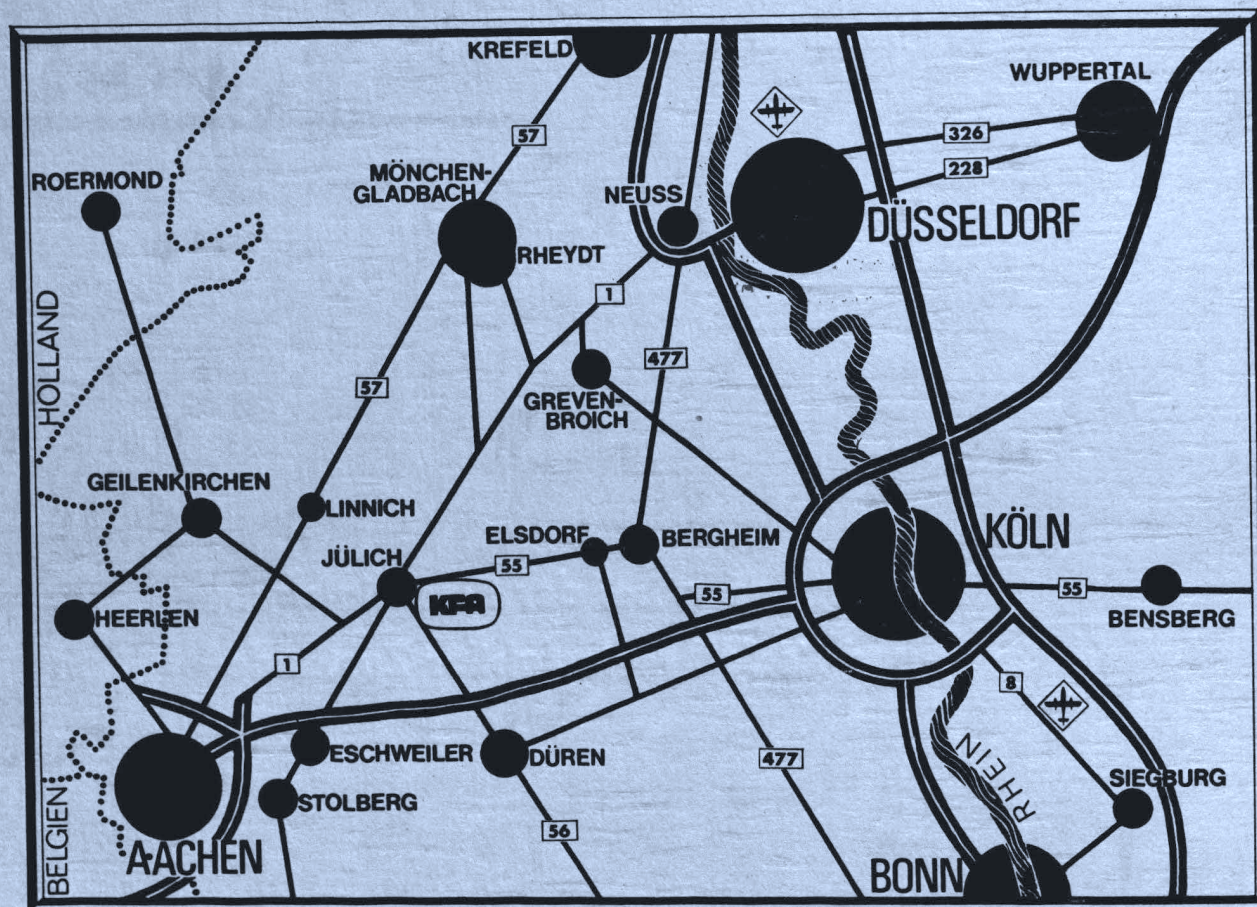
**Resonanzen bei der Potentialstreuung
und Zerfall metastabiler Zustände**

von

J. Batsch

Jül - 1187
April 1975

Als Manuskript gedruckt



Berichte der Kernforschungsanlage Jülich – Nr. 1187

Institut für Festkörperforschung Jülich - 1187

Dok.: Potential Scattering - Resonance Scattering
 Resonance Scattering - S-Matrix
 Resonance Scattering - Decay, Approximation Method
 Decay - Resonance Scattering, Approximation Method
 WKB-Method - Resonance Scattering, Decay

Im Tausch zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH,
 Jülich, Bundesrepublik Deutschland

Resonanzen bei der Potentialstreuung und Zerfall metastabiler Zustände

von

J. Batsch

D 82 (Diss. T. H. Aachen)

A b s t r a c t:

The analytic properties of the S-matrix in the complex energy plane are reviewed for potential scattering with particular attention to resonance scattering and decay of metastable states. For a one dimensional model potential with a potential barrier and a repulsive core exact formulas are derived for the energy and width of a resonance in terms of the scattering amplitudes of the barrier and the repulsive core alone. For narrow resonances simple and intuitive results are obtained, which are applied to semiclassical cases where the WKB approximation is valid.

Inhaltsverzeichnis

I	Einleitung	2
II	Allgemeine Formulierung	6
	1) Analytische Eigenschaften der S-Matrix	6
	2) Resonanzstreuung	26
	3) Zeitentwicklung eines metastabilen Zustandes	35
	4) Feshbach-Formalismus und Lee-Modell	46
III	Quantitative Berechnung scharfer Resonanzen	60
IV	Beispiele und Näherungen	72
	1) Exakt lösbare Beispiele	72
	2) WKB-Methode	83
	3) Bardeen-Methode	100

Anhang

A	Integrale über C_0 und C_1	103
B	Streulösungen am Rechteckspotential	108
C	Streulösungen für das Dreieckspotential	110
D	Nullstellen von $g(k)$	112

I. Einleitung

Wir betrachten die Streuung an eindimensionalen Potentialen, die aus zwei Potentialbarrieren bestehen (Abb. 1a). Streut man an solchen Potentialen Wellenpakete mit Energien unterhalb der Maxima der Potentialwälle, so werden für bestimmte schmale Energiebereiche das reflektierte und das transmittierte Wellenpaket mit einer Verzögerungszeit emittiert, die groß ist gegenüber der Zeit, in der das ungestörte Wellenpaket den Potentialbereich durchlaufen würde. In diesen Fällen sprechen wir von Resonanzstreuung.

Bei den Resonanzenergien dringt das Wellenpaket, das normalerweise bei kleinen Energien im wesentlichen an der Vorderseite des Potentials reflektiert wird, langsam in das Potential ein, wird in der Mulde zwischen den Barrieren festgehalten und verläßt den Potentialbereich allmählich wieder durch Tunneln. Es entsteht also vorübergehend ein metastabiler Zustand. Der Resonanzbereich wird umso schmaler und die Verzögerungszeit umso länger, je breiter und höher die Potentialbarrieren sind, d.h. je geringer ihre Durchlässigkeit ist (Abb. 1b,c).

Starke Verzögerung des gestreuten Wellenpaketes bedeutet starke Störung der einfallenden Welle durch das Potential. Die Amplitudenquadrate der Streuwellen und damit des Reflexionskoeffizienten durchlaufen als Funktionen der Energie im Resonanzbereich eine Lorentzkurve, deren Maximum im Zentrum der Resonanz liegt. Bei guten oder scharfen Resonanzen, auf die wir uns im folgenden beschränken, ist dieses Maximum schmal.

Erzeugt man zwischen den Potentialwällen einen metastabilen Zustand von der oben beschriebenen Art, so wird dieser wie bei der Resonanzstreuung langsam zerfallen. Die Zerfallszeit ist umgekehrt proportional zur Breite der Resonanz.

In Kapitel II werden wir die Resonanzstreuung mit Hilfe der S-Matrix behandeln, die bei stationärer Streuung die Amplituden der einfallenden und auslaufenden Wellen verknüpft. Zu einer Resonanz

gehört ein Pol der S-Matrix bei komplexer Energie, deren Imaginärteil klein gegen den Realteil ist. Der Realteil des Pols liefert die Lage, der Imaginärteil die Breite der Resonanz. Mit Hilfe dieser Eigenschaft der S-Matrix werden wir das Streuverhalten in der Nähe der Resonanz diskutieren.

Für den Zerfall ergibt sich bei richtiger Wahl des Anfangszustandes ein exponentiell abfallendes Zeitverhalten. Die Zerfallskonstante oder der Kehrwert der Zerfallszeit ist proportional zur Breite der Resonanz.

Die Hauptaufgabe bei der Berechnung von Resonanzstreuung und Zerfall besteht also darin, die Pole der S-Matrix aus gegebenem Potential zu bestimmen.

Man kann den Zerfall formal auffassen als Übergang aus einem im wesentlichen in der Potentialmulde lokalisierten metastabilen Anfangszustand in dazu orthogonale Endzustände, die im wesentlichen außerhalb des Potentials liegen.

Mit Hilfe des in Kapitel II.4 dargestellten Feshbach-Formalismus kann man bei gegebenem Anfangszustand die Endzustände durch eine Eigenwertgleichung definieren und mit den Lösungen dieser Gleichung die Zerfallszeit näherungsweise berechnen. Für Potentialstreu-probleme ist dieses Verfahren schlecht geeignet, da das Ergebnis empfindlich von der Wahl des Anfangszustandes abhängt und die Berechnung der Endzustände schwierig ist. Ein Beispiel dafür werden wir in Kapitel IV diskutieren. Bei anderen Modellen mit Resonanzverhalten wird der Zerfall oft durch Kopplung eines Systems in einem gebundenen Zustand an ein anderes System, z.B. ein Feld bewirkt. In diesen Fällen lassen sich Anfangs- und Endzustände leicht als Eigenzustände der ungekoppelten Systeme definieren. Der Feshbach-Formalismus liefert hier bei scharfen Resonanzen gute Ergebnisse.

Für die Zerfallszeit bei Potentialstreuung ist eine halbklassische Formel bekannt. Diese wird meist angegeben für ein Potential nach Abb. 20, das aus einer Potentialbarriere und einem bei kleinen Abständen abstoßenden Kern besteht. Man stellt sich vor, daß ein Teilchen mit der Resonanzenergie E_r mit der Frequenz ν nach den klassischen

Bewegungsgleichungen zwischen den Potentialteilen hin- und herläuft. Bei jedem Anstoßen an der rechten Potentialbarriere soll es mit einer Wahrscheinlichkeit D durchgelassen werden, die mit dem Transmissionskoeffizienten bei stationärer Streuung an dieser Barriere identifiziert wird. Damit ist die Zerfallswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit oder der Kehrwert der Zerfallszeit

$$\frac{1}{\tau} = v(E_r) D(E_r), \quad (1.1)$$

Diese Betrachtung liefert keine Aussage über E_r . Außerdem muß man im allgemeinen quantenmechanische Korrekturen an (1.1) erwarten.

Wir werden in Kapitel III die Pole der S-Matrix durch Streueigenschaften der in Abb. 21a,b skizzierten einfacher strukturierten Potentiale, die durch Zerschneiden des ursprünglichen Potentials an einem Punkt innerhalb der Potentialmulde entstehen, ausdrücken. Für die Zerfallszeit ergibt sich wieder ein Ausdruck der Form (1.1). Der Frequenzfaktor muß hier aber anders interpretiert werden, nämlich als die Frequenz, mit der das Zentrum eines Wellenpaketes in der Potentialmulde hin- und herläuft. Diese Frequenz weicht wegen der Verzögerung bei der Reflexion eines Wellenpaketes gegenüber der klassischen Bewegung von der klassischen Frequenz ab.

Damit ist das Problem der Streuung an einem Potential nach Abb. 20, bei dem sich in der Resonanz die die Streuung beschreibenden Größen mit der Energie schnell ändern, auf zwei einfachere Probleme mit langsam veränderlichen Streueigenschaften zurückgeführt. Die Streuung an solchen Potentialen ist, zumindest in Näherungen, leichter zu behandeln als das volle Potential nach Abb. 20.

In Kapitel IV werden wir die Ergebnisse von Kapitel III auf zwei exakt lösbare Beispiele anwenden, und dabei insbesondere die Abweichungen von der Formel (1.1) in klassischer Auffassung diskutieren. Für andere Potentiale werden wir die WKB-Näherungsmethode

anwenden und dabei sehen, daß die Lage der Resonanz aus der Bohr-Sommerfeld-Quantisierung folgt und die Frequenz ν gleich der klassischen Frequenz ist.

II. Allgemeine Formulierung

1) Analytische Eigenschaften der S-Matrix

Bevor wir das relativ komplizierte Problem des Zerfalls von metastabilen Zuständen behandeln, untersuchen wir die Eigenschaften der stationären Lösungen für ein einfaches eindimensionales Modell.

Ein System der in Abb. 1 skizzierten Art möge beschrieben sein durch den Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V(x). \quad (2.1)$$

Wir untersuchen zunächst die analytischen Eigenschaften der Ortsdarstellung der retardierten Streuzustände

$$\psi_k^{(+)}(x) = \langle x | k^{(+)} \rangle. \quad (2.2)$$

Die Ergebnisse werden qualitative Aussagen über die Eigenzustände des Systems, insbesondere über die Streuzustände liefern.

Für die Streulösungen $|k^{(+)}\rangle$ gilt die Lippmann-Schwinger-Gleichung

$$|k^{(+)}\rangle = |k\rangle + G_0^{(+)}(E) V |k^{(+)}\rangle \quad (2.3a)$$

$$= |k\rangle + |k^{(+)}\rangle^S \quad (2.3b)$$

mit
$$E = E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (2.4)$$

Dabei ist

$$\langle x | k \rangle = \varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \quad (2.5)$$

die einlaufende Welle in Ortsdarstellung.

Es gilt ⁺⁾

$$\langle k | k' \rangle = \delta(k - k'). \quad (2.6)$$

Die freie Greensche Funktion

$$G_0^{(+)}(E) = \frac{1}{E + i\varepsilon - \mathcal{H}_0}, \quad \varepsilon \rightarrow +0, \quad (2.7a)$$

lautet in Ortsdarstellung

$$G_0^{(+)}(E; x, x') = \langle x | G_0^{(+)}(E) | x' \rangle = -\frac{mi}{\hbar^2 |k|} e^{i|k||x-x'|}. \quad (2.7b)$$

Für die asymptotische Entwicklung der gestreuten Welle (x-Werte außerhalb des Potentials) findet man mit Hilfe von Gleichung (2.7b)

$$\langle x | k^{(+)} \rangle^S = \psi_k^{(+)}(x) \propto -\frac{mi}{\hbar^2 |k|} e^{i|k||x|} \int dx' e^{-i|k| \log x \cdot x'} V(x') \psi_k^{(+)}(x') \quad (2.8)$$

⁺⁾ Die Zustände $|k^{(+)}\rangle$ sind normiert wie die Zustände $|k\rangle$.
(Goldberger, Watson /4/)

Mit $|k'| = |k| \operatorname{sgn} x$ und wegen $|x| = x \operatorname{sgn} x$ wird aus Gleichung (2.8)

$$\psi_k^{\text{WS}}(x) \propto -\frac{\sqrt{2\pi} m i}{\hbar^2 |k|} T_{k'k} e^{ik'x} \quad (2.9a)$$

$$= f_{k'k} \varphi_{k'}(x) \quad (2.9b)$$

mit der T-Matrix

$$T_{k'k} = \langle k' | V | k^{(+)} \rangle \quad (2.10)$$

und den Streuamplituden

$$f_{k'k} = -\frac{2\pi m i}{\hbar^2 |k|} T_{k'k}. \quad (2.11)$$

Die formale Lösung der Lippmann-Schwinger-Gleichung (2.3a) lautet

$$|k^{(+)}\rangle = \frac{1}{1 - G_0^{(+)}(E)V} |k\rangle \quad (2.12a)$$

oder

$$|k^{(+)}\rangle = (1 + G_0^{(+)}(E)T) |k\rangle \quad (2.12b)$$

mit dem T-Operator

$$T = V \frac{1}{1 - G_0^{(+)}(E)V}. \quad (2.13)$$

Aus Gleichung (2.10) wird dann mit den Gleichungen (2.12a) und (2.13)

$$T_{k'k} = \langle k' | T | k \rangle. \quad (2.14)$$

Ein weiterer Ausdruck für die formale Lösung der Lippmann-Schwinger-Gleichung ist nach Gleichung (2.12a)

$$|k^{(+)}\rangle = \left(1 + \frac{1}{1 - G_0^{(+)} V} G_0^{(+)} V\right) |k\rangle. \quad (2.15)$$

Mit Hilfe der Darstellung (2.7a) für $G_0^{(+)}(E)$ kann man $|k^{(+)}\rangle$ in Gleichung (2.15) auch schreiben als

$$|k^{(+)}\rangle = (1 + G^{(+)}(E) V) |k\rangle \quad (2.16)$$

mit der totalen Greenschen Funktion

$$G^{(+)}(E) = \frac{1}{E + i\varepsilon - \mathcal{H}}. \quad (2.17)$$

Es ist oft günstig, die Streuung mit der S-Matrix

$$S_{k'k} = \langle k'^{-} | k^{(+)} \rangle \quad (2.18)$$

zu beschreiben, die, wie wir zeigen werden, dieselbe Information enthält wie die T-Matrix. Die in Gleichung (2.18) auftretenden Zustände $|k'^{-}\rangle$ sind die avancierten Streulösungen, d.h.

Lösungen der Lippmann-Schwinger-Gleichung

$$|k^{(-)}\rangle = |k\rangle + G_0^{(-)}(E)V|k^{(-)}\rangle \quad (2.19)$$

mit der avancierten Greenschen Funktion

$$G_0^{(-)}(E) = \frac{1}{E - i\varepsilon - \mathcal{H}_0}, \quad \varepsilon \rightarrow +0. \quad (2.20)$$

Alle formalen Ausdrücke für die $|k^{(-)}\rangle$ findet man analog zu den Resultaten für die retardierten Zustände $|k^{(+)}\rangle$.

Die Vorteile der Beschreibung mit der S-Matrix liegen zum Teil in der Unitarität dieser Matrix, die man folgendermaßen beweisen kann. Es gilt

$$\begin{aligned} & \int dk'' S_{k'k''} S_{k''k}^* \\ &= \int dk'' \langle k'^{(-)} | k''^{(+)} \rangle \langle k^{(-)} | k''^{(+)} \rangle^* \\ &= \int dk'' \langle k'^{(-)} | k''^{(+)} \rangle \langle k''^{(+)} | k'^{(-)} \rangle \\ &= \langle k'^{(-)} | k^{(-)} \rangle = \delta(k' - k) \end{aligned}$$

da die Zustände $|k''^{(+)}\rangle$ den Raum der Streuzustände vollständig aufspannen. Analog beweist man

$$\int dk'' S_{k''k'}^* S_{k''k} = \delta(k' - k)$$

Den Zusammenhang der S-Matrix mit der T-Matrix findet man folgendermaßen.

Mit Gleichung (2.18) und den zu (2.16) und (2.17) analogen Beziehungen für $|k^{(-)}\rangle$ ist

$$\begin{aligned} S_{k'k} &= ([1 + G^{(-)}(E')V] \varphi_{k'}, \psi_k^{(+)}) \\ &= (\varphi_{k'}, \psi_k^{(+)}) + (\varphi_{k'}, V \frac{1}{E' + i\varepsilon - \mathcal{H}} \psi_k^{(+)}) \end{aligned}$$

oder

$$S_{k'k} = (\varphi_{k'}, \psi_k^{(+)}) + (\varphi_{k'}, V \frac{1}{E' + i\varepsilon - E} \psi_k^{(+)}). \quad (2.21)$$

Mit Gleichung (2.12b) findet man analog

$$(\varphi_{k'}, \psi_k^{(+)}) = (\varphi_{k'}, \varphi_k) + (\varphi_{k'}, \frac{1}{E + i\varepsilon - E'} T \varphi_k). \quad (2.22)$$

Damit folgt

$$S_{k'k} = \delta(k' - k) + \left[\frac{1}{E - E' + i\varepsilon} - \frac{1}{E - E' - i\varepsilon} \right] T_{k'k}(E).$$

Mit der allgemeinen Beziehung

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\delta(x), \quad \varepsilon \rightarrow +0 \quad (2.23)$$

($\mathcal{P}$ = Cauchyscher Hauptwert)

wird daraus

$$S_{k'k} = \delta(k-k') - 2\pi i \delta(E-E') T_{k'k}(E). \quad (2.24)$$

Wegen Gleichung (2.4) gilt

$$\delta(E-E') = \frac{m}{k^2 |k|} \left\{ \delta(|k|-|k'|) + \delta(|k|+|k'|) \right\}. \quad (2.25)$$

Da $|k|$ und $|k'| > 0$ sind, kann man die zweite δ -Funktion auf der rechten Seite von Gleichung (2.25) weglassen. Damit wird aus Gleichung (2.24) unter Berücksichtigung von Gleichung (2.11)

$$S_{k'k} = \delta(k'-k) + f_{k'k} \delta(|k'|-|k|). \quad (2.26)$$

Mit der S - Funktion

$$\hat{S}_{k'k} = \delta_{\text{reg} k' \text{reg} k} + f_{k'k} \quad (2.27)$$

läßt sich Gleichung (2.26) in der Form

$$S_{k'k} = \delta(|k'|-|k|) \hat{S}_{k'k} \quad (2.28)$$

schreiben.

Mit Hilfe von (2.27) und (2.28) kann man eine anschauliche Deutung der S -Matrix finden. Die allgemeine Streulösung $\phi_k(x)$ zur Energie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ lautet asymptotisch (Abb. 3) mit $k > 0$

$$\phi_k(x) = a_-(k) e^{-ikx} + A_+(k) e^{ikx} \quad \text{für } x > 0, \quad (2.29)$$

$$\phi_k(x) = a_+(k) e^{ikx} + A_-(k) e^{-ikx} \quad \text{für } x < 0. \quad (2.30)$$

Dabei können zwei der Koeffizienten $a_{\pm}(k)$, $A_{\pm}(k)$ willkürlich vorgegeben werden.

Mit Gleichung (2.27) und der asymptotischen Entwicklung der Funktionen $\psi_k^{(+)}(x)$, $\psi_{-k}^{(+)}(x)$ nach den Gleichungen (2.3b) und (2.9b) ergibt sich der Zusammenhang

$$\begin{pmatrix} A_+(k) \\ A_-(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{S}_{kk} & \hat{S}_{k-k} \\ \hat{S}_{-kk} & \hat{S}_{-k-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_+(k) \\ a_-(k) \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

Die Matrix $\hat{S}_{k'k}$ verknüpft also die Amplituden der auslaufenden Wellen linear mit den Amplituden der einfallenden Wellen.

Dieser Zusammenhang wird besonders einfach, wenn man Gleichung (2.31) auf Hauptachsen transformiert.

Im folgenden beschränken wir die Diskussion auf inversionssymmetrische Potentiale

$$V(x) = V(-x) \quad (2.32)$$

bei denen sich die Hauptachsentransformation sehr leicht ausführen läßt.

Mit Hilfe der Ortsdarstellung der Lippmann-Schwinger-Gleichung findet man für solche Potentiale die Beziehung (k, k' beliebig reell)

$$\psi_k^{(\pm)}(x) = \psi_{-k}^{(\pm)}(x). \quad (2.33)$$

Damit ist

$$\begin{aligned} S_{-k'-k} &= (\psi_{-k'}^{(-)}(x), \psi_{-k}^{(+)}(x)) = (\psi_{k'}^{(-)}(-x), \psi_k^{(+)}(-x)) \\ &= (\psi_{k'}^{(-)}(x), \psi_k^{(+)}(x)), \end{aligned} \quad (2.34)$$

d.h.

$$S_{-k'-k} = S_{k'k} \quad \text{oder} \quad \hat{S}_{-k'-k} = \hat{S}_{k'k}. \quad (2.35)$$

Die Eigenwertgleichung

$$\begin{pmatrix} \hat{S}_{kk} & \hat{S}_{k-k} \\ \hat{S}_{-bk} & \hat{S}_{-b-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_+(k) \\ a_-(k) \end{pmatrix} = s(k) \begin{pmatrix} a_+(k) \\ a_-(k) \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

hat wegen der Unitarität der S-Matrix (und damit der S -Funktion im 2×2 -Unterraum zur Energie E) Eigenwerte vom Betrag eins

$$s(k) = e^{2i\delta(k)}. \quad (2.37)$$

Die Größe $\delta(k)$ heißt Streuphase.

Aus der Eigenschaft (2.35) folgt, daß die Eigenvektoren von Gleichung (2.36) symmetrisch

$$\underline{a}_s(k) = \begin{pmatrix} a_{s+}(k) \\ a_{s-}(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.38a)$$

mit dem Eigenwert $s_s(k)$ oder antisymmetrisch

$$\underline{a}_a(k) = \begin{pmatrix} a_{a+}(k) \\ a_{a-}(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (2.38b)$$

mit dem Eigenwert $s_a(k)$ sind.

Aus der Eigenwertgleichung (2.36) ergeben sich mit (2.38a-b) und (2.27) die Zusammenhänge

$$s_s = 1 + f_+ + f_- \quad (2.39a)$$

und

$$s_a = 1 + f_+ - f_- \quad (2.39b)$$

mit den Streuamplituden

$$f_+(k) = f_{kk} = f_{-k-k} ; f_- = f_{k-k} = f_{-kk} . \quad (2.40)$$

Die in Gleichung (2.40) benutzten Symmetrien der Streuamplituden

folgen aus der Symmetrie (2.35) der S-Matrix.

Die zum symmetrischen bzw. antisymmetrischen Eigenvektor der S-Matrix gehörenden Streulösungen $\psi_s^k(x)$, $\psi_a^k(x)$ sind symmetrisch bzw. antisymmetrisch in x und lauten asymptotisch für große $|x|$ (mit (2.38a-b), (2.36) und (2.29))

$$\psi_s^k(x) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(e^{-ik|x|} + S_s(k) e^{ik|x|} \right) \quad (2.41a)$$

$$\psi_a^k(x) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(e^{-ik|x|} - S_a(k) e^{ik|x|} \right) \operatorname{sgn} x. \quad (2.41b)$$

Mit der Auffassung der Funktionen $S_{s,a}(k)$ als Quotienten der Amplitude der einlaufenden (symmetrischen oder antisymmetrischen) Welle und der auslaufenden Welle können wir eine Darstellung dieser Funktionen finden. Wir stellen die Funktionen $\psi_a^k(x)$ und $\psi_s^k(x)$ für alle x in einer zu den Gleichungen (2.41a-b) analogen Form dar. Zu diesem Zweck ersetzen wir die Funktionen $(2\sqrt{\pi})^{-1} e^{\pm ik|x|}$ bzw. $(2\sqrt{\pi})^{-1} \operatorname{sgn} x e^{\pm ik|x|}$ durch Lösungen der Schrödingergleichung $f_s(\pm k, x)$ bzw. $f_a(\pm k, x)$ mit demselben asymptotischen Verhalten. Diese Funktionen müssen aus Gründen der Stromerhaltung Quellen oder Senken haben. Bei symmetrischem Potential wählt man diese Quelle oder Senke zweckmäßigerweise punktförmig bei $x=0$. Die Gesamtfunktionen $\psi_s^k(x)$ und $\psi_a^k(x)$ müssen überall die Schrödingergleichung erfüllen, d.h. insbesondere, sie müssen bei $x=0$ quellfrei sein. Diese Bedingung wird uns eine Darstellung der Funktionen $S_{s,a}(k)$ liefern.

Die für die Darstellung der Funktionen $\psi_s^k(x)$ erforderlichen symmetrischen Funktionen lassen sich nur mit einer symmetrischen Quelle erzeugen. Wir definieren eine symmetrische Funktion $G_s(k, x)$ mit der Differentialgleichung

$$(E - \mathcal{H}) G_s(k, x) = \delta(x) \quad (2.42)$$

und dem asymptotischen Verhalten

$$G_S(k, x) \propto C_S(k) e^{ik|x|}. \quad (2.43)$$

Diese Funktion hat bis auf den Faktor $C_S(k)$ die gewünschten Eigenschaften. Es ist also

$$f_S(k, x) = \frac{G_S(k, x)}{2\sqrt{\pi} C_S(k)}. \quad (2.44)$$

Damit lautet die symmetrische Lösung für alle x

$$\psi_S^k(x) = f_S(-k, x) + S_S(k) f_S(k, x). \quad (2.45)$$

$f_S(-k, x)$ ist dabei als analytische Fortsetzung von $f_S(k, x)$ auf negative k aufzufassen. Aus der Schrödingergleichung $(E - \mathcal{H}) \psi_S^k = 0$ folgt die Bedingung für das Verschwinden der Quelle der Gesamtfunktion $\psi_S^k(x)$:

$$\delta(x) \left(\frac{1}{C_S(-k)} + S_S(k) \frac{1}{C_S(k)} \right) = 0$$

und damit

$$S_S(k) = - \frac{C_S(k)}{C_S(-k)} \quad (2.46)$$

Für die antisymmetrische Lösung brauchen wir antisymmetrische Funktionen $G_A(k, x)$ und damit eine antisymmetrische Quelle. Wir definieren $G_A(k, x)$ durch die Differentialgleichung

$$(E - \mathcal{H}) G_a(k, x) = \delta'(x) \quad (2.47)$$

und die asymptotische Bedingung

$$G_a(k, x) \propto C_a(k) e^{ik|x|} \operatorname{sgn} x. \quad (2.48)$$

Mit

$$f_a(k, x) = \frac{G_a(k, x)}{2\sqrt{\pi} C_a(k)} \quad (2.49)$$

wird für alle x

$$\psi_a^k(x) = f_a(-k, x) - S_a(k) f_a(k, x). \quad (2.50)$$

Aus der Quellfreiheit für $x=0$ folgt ⁺⁾

$$S_a(k) = \frac{C_a(k)}{C_a(-k)}. \quad (2.51)$$

Die Gleichungen (2.46) und (2.51) liefern

$$S_i(k) S_i(-k) = 1 \quad (i = s, a). \quad (2.52)$$

⁺⁾ Üblicherweise werden in der Literatur die Funktionen $S_{i,a}(k)$ durch die Jostfunktionen $f_i(-k) = \frac{1}{C_i(k)}$ dargestellt (Geltman / 5 /)

Aus dem Vergleich der Differentialgleichungen und der asymptotischen Bedingung sieht man:

$$G_i^*(k^*, x) = G_i(-k, x), \quad (2.53)$$

Damit ist

$$S_s(k) = - \frac{C_s(k)}{C_s^*(k^*)} \quad (2.54)$$

und

$$S_a(k) = \frac{C_a(k)}{C_a^*(k^*)} \quad (2.55)$$

Daraus folgt

$$S_i(k) S_i^*(k^*) = 1. \quad (2.56)$$

Aus den Gleichungen (2.52) und (2.56) folgt: Wenn k eine Nullstelle von $S_i(k)$ ist, so sind $(-k)$ und k^* Polstellen. Nach Gleichung (2.52) ist dann $(-k^*)$ auch eine Nullstelle (Abb.4a). Stellt man die S-Matrix als Funktion der Energie (Gleichung (2.4)) dar, so geht wegen des quadratischen Zusammenhanges mit k die komplexe k -Ebene in die zweiblättrige Riemannsche E-Fläche über. Der Verzweigungspunkt liegt bei $E = 0$, und den Schnitt legt man üblicherweise längs der positiv reellen Achse, so daß die obere Ebene in das zweite Blatt der Riemannschen E-Fläche übergeht. Es folgt dann aus den oben gemachten Aussagen über die Lage der Nullstellen und Pole der S-Matrix in der k -Ebene: Wenn bei E eine Nullstelle im 1. Blatt liegt, so liegt auch bei E^* im ersten Blatt eine Nullstelle. Bei E und E^* im zweiten Blatt liegen dann Pole (Abb.4b).

Nach den Gleichungen (2.45) und (2.50) bedeutet ein Pol von $S_+(k)$ bei $k = k_p$ (bzw. eine Nullstelle bei $k = k_n$), daß $f_+(k_p, x)$ (bzw. $f_+(-k_n, x)$) allein Lösung der Schrödingergleichung für alle x ist. Die Eigenfunktion hat also in diesem Fall nur eine auslaufende bzw. nur eine einfallende Welle. Liegt der Pol auf der positiv imaginären Achse ($k_p = i\kappa$ mit $\kappa > 0$), so fällt die Funktion $f_+(i\kappa, x)$ gemäß den Gleichungen (2.43) und (2.48) für große $|x|$ exponentiell ab. Sie stellt also einen gebundenen Zustand dar. Denselben gebundenen Zustand findet man bei der Nullstelle $-i\kappa$. In der Riemannschen E-Fläche liegt der Pol bei negativ reellem E im ersten Blatt, die Nullstelle bei derselben Energie im zweiten Blatt (Abb. 5a,b). Außer den gebundenen Zuständen gibt es noch andere Typen von Polen und Nullstellen der S-Matrix, die wir am Beispiel des Potentials (Abb. 6)

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \alpha [\delta(x-a) + \delta(x+a)] - \beta \delta(x) \right\} \quad (2.57)$$

diskutieren wollen.

Für diesen Fall lautet die Differentialgleichung der symmetrischen Funktion $G_s(k, x)$ nach Gleichung (2.42)

$$\frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - 2\kappa^2 - \alpha \delta(x-a) - \alpha \delta(x+a) + \beta \delta(x)) G_s(k, x) = \delta(x). \quad (2.58)$$

Mit dem Ansatz

$$G_s(k, x) = A_s e^{ik|x|} + B_s e^{-ik|x|} \quad \text{für } |x| < a \quad (2.59a)$$

$$G_s(k, x) = C_s e^{ik|x|} \quad \text{für } |x| > a \quad (2.59b)$$

lautet die Grenzbedingung bei $x = 0$

$$2ik(A_S - B_S) + \beta(A_S + B_S) = \frac{2m}{\hbar^2} \quad (2.60a)$$

Wegen der Stetigkeit der Funktion und dem Sprung in der Ableitung bei $x=0$ folgt

$$A_S e^{ika} + B_S e^{-ika} = C_S e^{ika} \quad (2.60b)$$

$$-ik A_S e^{ika} + ik B_S e^{-ika} = (\alpha - ik) C_S e^{ika} \quad (2.60c)$$

Aus den Gleichungen (2.60a-c) erhält man

$$A_S = - \frac{\alpha - 2ik}{2ik} C_S, \quad (2.61a)$$

$$B_S = \frac{\alpha e^{2ika}}{2ik} C_S, \quad (2.61b)$$

$$C_S = \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \frac{2ik}{-(2ik + \beta)(\alpha - 2ik) + (\beta - 2ik)\alpha e^{2ika}}. \quad (2.61c)$$

Damit wird nach Gleichung (2.46)

$$S_S(k) = \frac{(2ik - \beta)(\alpha + 2ik) + (\beta + 2ik)\alpha e^{-2ika}}{-(2ik + \beta)(\alpha - 2ik) + (\beta - 2ik)\alpha e^{2ika}}. \quad (2.62)$$

Für die antisymmetrische Funktion $G_a(k, x)$ mit der Differentialgleichung (nach Gleichung (2.47))

$$\frac{\hbar^2}{2m} (k^2 + \partial_x^2 - \alpha \delta(x+a) - \alpha \delta(x-a) + \beta \delta(x)) G_S(k, x) = \delta'(x) \quad (2.63)$$

machen wir den Ansatz

$$G_a(k, x) = (A_a e^{ik|x|} + B_a e^{-ik|x|}) \operatorname{sgn} x \quad \text{für } |x| < a \quad (2.64a)$$

$$G_a(k, x) = C_a e^{ik|x|} \operatorname{sgn} x \quad \text{für } |x| > a. \quad (2.64b)$$

Die Anschlußbedingung bei $x=0$ lautet

$$2(A_a + B_a) = 1. \quad (2.65)$$

Die Bedingungen bei $|x|=a$ sind analog zu den Gleichungen (2.60a-c) und damit auch die Ausdrücke für A_a und B_a analog zu den Gleichungen (2.61a-b) mit

$$C_a = \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \frac{ik}{\alpha e^{2ika} - \alpha + 2ik}. \quad (2.66)$$

Damit wird nach Gleichung (2.51)

$$s_a(k) = - \frac{\alpha e^{-2ika} - \alpha - 2ik}{\alpha e^{2ika} - \alpha + 2ik}. \quad (2.67)$$

Für die Pole der Funktion $s_s(k)$ gilt

$$-(2ik + \beta)(\alpha - 2ik) + (-2ik + \beta) \alpha e^{2ika} = 0. \quad (2.68)$$

Zunächst suchen wir nach den gebundenen Zuständen ($k = i\kappa$).
Dann wird aus Gleichung (2.68)

$$e^{-2\kappa a} = \frac{(\beta - 2\kappa)(\alpha + 2\kappa)}{\alpha(\beta + 2\kappa)} \quad (2.69)$$

Diese Gleichung ist erfüllt für $\kappa = 0$. Da an dieser Stelle auch der Zähler von $S_s(k)$ eine einfache Nullstelle hat, liegt hier kein Pol vor. Die graphische Lösung von Gleichung (2.69) ist in Abb. 7a-c für verschiedene Verhältnisse α/β mit $\beta > 0$ skizziert. Für hinreichend große a , d.h. große Steigungen der Exponentialfunktion gibt es offenbar immer eine Lösung mit $\kappa > 0$. An der antisymmetrischen Lösung diskutieren wir einen weiteren Typ von Polen. Für $\alpha \rightarrow \infty$ gibt es gebundene Zustände mit positiver Energie. Für große α erwartet man dann Zustände, die gebundenen ähnlich sind. Wir berechnen die Lage der Pole für große α in der Entwicklung nach $1/\alpha$. Die Pole der antisymmetrischen Funktion ψ_a^k ergeben sich nach (2.67) aus

$$\alpha e^{2ik a} - \alpha + 2ik = 0 \quad (2.70)$$

oder

$$\tan ka = \frac{-k}{\alpha - ik} \quad (2.71)$$

Für $\alpha \rightarrow \infty$ hat diese Gleichung die Lösung

$$k_{0,n} = \frac{n\pi}{a} \quad (n \text{ ganz}). \quad (2.72)$$

mit ganzem n . Die Lösung mit $n=0$ hat wieder keine Bedeutung, weil der Zähler von $S_a(k)$ ebenfalls dort eine Nullstelle hat. Mit dem Ansatz

$$k_{p,n} = k_{0,n} + \frac{k_1}{\alpha} + \frac{k_2}{\alpha^2} + \dots \quad (2.73)$$

wird aus Gleichung (2.71) in der Entwicklung nach $1/\alpha$ bis zur zweiten Ordnung

$$\frac{k_1 \alpha}{\alpha} + \frac{k_2 \alpha}{\alpha^2} = - \frac{k_{0,n}}{\alpha} - \frac{k_1}{\alpha^2} - \frac{i k_{0,n}}{\alpha^2} \quad (2.74)$$

Koeffizientenvergleich liefert

$$k_{p,n} = k_{0,n} \left[1 - \frac{1}{\alpha a} + \frac{1}{\alpha^2 a^2} (1 - i k_{0,n} a) \right] \quad (2.75)$$

Die Pole liegen für nicht zu große n dicht unterhalb der reellen Achse. Der Übergang von $k_{p,n}$ zu $k_{p,-n}$, also von $k_{0,n}$ zu $-k_{0,n}$ bedeutet nach Gleichung (2.75) den Übergang von $k_{p,n}$ zu $(-k_{p,n}^*)$ wie es den allgemeinen Bedingungen für Pole und Nullstellen der S-Matrix entspricht (Abb. 8a). In der Riemannschen E-Fläche liegen die Pole im zweiten Blatt dicht oberhalb und unterhalb der positiv reellen Achse (Abb. 8b). Die zugehörigen Funktionen $\psi_{res}(x)$ sind, da nach den Gleichungen (2.72) und (2.75) ungefähr eine ganze Anzahl von Wellenlängen mit einem Knoten bei $x=0$ zwischen $x=-a$ und $x=a$ liegt, innen stark konzentriert und fallen zu den äußeren $\mathcal{O}$ -Funktionen hin stark ab. Außerhalb des Potentials steigen sie von einer zunächst kleinen Amplitude wegen des kleinen negativen Imaginärteils von k_p unter Oszillationen schwach exponentiell an (Abb. 9). Diese unphysikalischen, nicht normierbaren Zustände bezeichnen wir als Resonanzfunktionen ⁺⁾ und die zugehörigen Pole als Resonanzpole.

⁺⁾ Es gibt für unser Beispiel auch symmetrische Resonanzfunktionen, deren Energien wir hier nicht angeben, da sich relativ unübersichtliche Ausdrücke ergeben.

In der Nähe von $k = k_p$ auf der reellen k -Achse ändern sich die Streuphasen und damit die Streuamplituden in einem Bereich von der Größenordnung Δk_p recht erheblich, wie wir weiter unten sehen werden. Das dort beschriebene Verhalten nennt man Resonanzstreuung.

Allgemein nennen wir Zustände, die zu Polen in der unteren k -Halbebene, bzw. im zweiten Blatt der E-Fläche, gehören, virtuell. Die oben diskutierten Resonanzfunktionen sind Spezialfälle hiervon.

In der oberen k -Halbebene kann es keine Pole mit $k_p \neq 0$ geben. Denn diese würden asymptotisch für große $|X|$ exponentiell abfallen, also gebundene Zustände mit komplexer Energie darstellen, die es wegen der Hermitezität des Hamiltonoperators nicht gibt. In der oberen k -Halbebene gibt es also nur Pole zu gebundenen Zuständen auf der imaginären Achse. Im ersten Blatt der E-Fläche gibt es nur die entsprechenden Pole auf der negativ reellen Achse. Man nennt daher das erste Blatt der E-Fläche auch "physikalisches" Blatt. Die Eigenzustände zu Polen im zweiten, "unphysikalischen" Blatt steigen asymptotisch für große $|X|$ exponentiell an und sind daher keine stationären Zustände des Systems.

In unserem Beispiel finden wir außer den Resonanzzuständen noch weitere virtuelle Zustände. Nach Abb. 7 hat $S_s(k)$ immer einen Pol für $X < 0$, d.h. auf der negativ imaginären k -Achse. Dazu gehören Eigenfunktionen mit außen rein exponentiell ansteigendem Verlauf.

Zusammenfassend können wir folgendes über die Pole der S-Matrix aussagen.

- 1) Zu den gebundenen Zuständen gehören Pole auf der negativ reellen Achse im ersten Blatt. Weitere Pole gibt es im ersten Blatt nicht.
- 2) Zu den virtuellen Zuständen gehören Pole im zweiten Blatt. Speziell nennen wir Zustände zu Polen in der Nähe der positiv reellen Achse ($\text{Im } E_p \ll \text{Re } E_p$) Resonanzzustände.

Zu jedem Pol gehört eine Nullstelle mit derselben Energie im jeweils anderen Blatt.

2) Resonanzstreuung

Im folgenden betrachten wir Streuphasen und Streuamplituden in der Nähe eines Resonanzpoles für eindimensionale inversionssymmetrische Potentiale. Im zweiten Riemannschen Blatt liege ein Resonanzpol der Funktion $s(E)$ ($s(E) = \zeta_s(E)$ oder $\zeta_a(E)$) bei

$$E = E_p = E_r - \frac{i\Gamma}{2}, \quad 0 < \frac{\Gamma}{2} \ll E_r. \quad (2.77)$$

Dann liegt nach den allgemeinen Aussagen über Pole und Nullstellen der S-Matrix eine Nullstelle bei $E = E_p^*$ im ersten Blatt. In dem Übergangsbereich von der oberen Halbebene im ersten Blatt zur unteren Halbebene im zweiten Blatt (Abb. 10) können wir daher $s(E)$ mit einer geeigneten Funktion $g(E)$ in der Form

$$s(E) = g(E) \frac{E - E_r - \frac{i\Gamma}{2}}{E - E_r + \frac{i\Gamma}{2}} \quad (2.78)$$

mit in der Nähe von $E = E_p$ regulärem, d.h. langsam veränderlichem $g(E)$ darstellen.

Für reelle E haben $s_r(E)$ und der Bruch auf der rechten Seite von Gleichung (2.78) den Betrag eins. Daher muß auch $g(E)$ ein Phasenfaktor sein

$$g(E) = e^{2i\hat{\delta}(E)} \quad (2.79)$$

Die Streuphase $\delta(E)$ ⁺⁾ ist damit

⁺⁾ Das ist nach Gleichung (2.37) die Phase der Funktion $s(k)$ bei positiv reellem k . In Abhängigkeit von E ist daher $\delta(E)$ die Phase von $s(E)$ am oberen Schnittufer im ersten Blatt.

$$\delta(E) = \arccot \frac{2(E_r - E)}{\Gamma} + \tilde{\delta}(E). \quad (2.80)$$

Für die $\arccot$ -Funktion wählen wir willkürlich den Hauptwert, da die Streuphase nur modulo π definiert ist.

Nach Gleichung (2.80) springt die Streuphase in der Nähe von E_r in einem Bereich von der Größenordnung Γ um π (Abb. 11).

In Abb. 11a ist der Verlauf der Phase $\delta_a(k)$ für das Modellpotential nach Gleichung (2.57) mit $\alpha a = 8\pi$ dargestellt. Der Phasensprung um π ist nur bei schmalen Resonanzen realisiert. Bei kleinem α bzw. höherer Energie werden die Resonanzen breit und die Phasensprünge kleiner als π .

Wir untersuchen nun, wie sich dieses Verhalten der Streuphase bei Streuexperimenten bemerkbar macht.

Wir betrachten zunächst das eindimensionale Analogon σ zum Streuquerschnitt

$$\sigma = |f_+|^2 + |f_-|^2 \quad (2.81)$$

oder mit den Gleichungen (2.39a-b)

$$\sigma = \sigma_s + \sigma_a = \frac{1}{2} |S_s - 1|^2 + \frac{1}{2} |S_a - 1|^2 = 2(\sin^2 \delta_s + \sin^2 \delta_a). \quad (2.82)$$

Mit Hilfe der Gleichungen (2.80) und (2.82) findet man für den Wirkungsquerschnitt in der Nähe eines Resonanzpoles folgendes Verhalten (Abb. 12). Wenn $\tilde{\delta}(E_r) = n\pi$ (n ganz) ist, liegt bei $E = E_r$ ($\delta = (n + \frac{1}{2})\pi$) ein schmales, hohes Maximum. Für $(n - \frac{1}{2})\pi < \tilde{\delta}(E_r) < n\pi$ durchläuft die Phase im Resonanzbereich mit wachsender Energie zuerst den Wert $n\pi$ und dann den Wert $(n + \frac{1}{2})\pi$, d.h. der Wirkungsquerschnitt durchläuft zuerst ein Minimum und dann ein Maximum. Den Fall $n\pi < \tilde{\delta}(E_r) < (n + \frac{1}{2})\pi$

kann man analog behandeln.

Für den Fall $\hat{\sigma}(E_r) = n\pi$ findet man aus den Gleichungen (2.78) und (2.82) die Breit-Wigner-Formel für den Verlauf des Resonanzwirkungsquerschnittes (Abb. 13)

$$\sigma_i = \frac{\Gamma^2}{4} \cdot \frac{1}{(E-E_r)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \quad (2.83)$$

Abb. 11b zeigt den Verlauf des Wirkungsquerschnitts $\sigma_a = 2\sin^2\delta_a$ für das Modellpotential nach Gleichung (2.57). Zwischen zwei Resonanzen liegt ein breites Maximum, das durch den langsamen Abfall der Phase um etwa π zwischen den Resonanzen zustande kommt. Mit wachsender Energie verbreitern sich die Resonanzen und verlieren das Breit-Wigner-Verhalten.

Bei eindimensionalen Modellen haben der reflektierte und durchgelassene Strom eine anschaulichere Bedeutung als der Wirkungsquerschnitt. Wir nennen das Verhältnis von reflektiertem zu einfallendem Strom Reflexionskoeffizient

$$R = \frac{j_r}{j_e} = |f_-(k)|^2 = |r(k)|^2 \quad (2.84)$$

Analog definieren wir den Transmissionskoeffizienten D als Verhältnis des durchgelassenen zum einfallenden Strom

$$D = \frac{j_d}{j_e} = |1 + f_+(k)|^2 = |d(k)|^2 \quad (2.85)$$

Nach den Gleichungen (2.39a-b) gilt

$$r(k) = f_-(k) = \frac{1}{2} (s_s - s_a) = \frac{1}{2} (e^{2i\delta_s} - e^{2i\delta_a}) \quad (2.86a)$$

$$d(k) = 1 + f_+(k) = \frac{1}{2} (s_s + s_a) = \frac{1}{2} (e^{2i\delta_s} + e^{2i\delta_a}). \quad (2.86b)$$

Daraus folgt

$$r(k) = e^{i\delta_a} e^{i\delta_s} i \sin(\delta_s - \delta_a) \quad (2.87a)$$

$$d(k) = e^{i\delta_a} e^{i\delta_s} \cos(\delta_s - \delta_a) \quad (2.87b)$$

und damit

$$R = \sin^2(\delta_s - \delta_a) \quad (2.88a)$$

$$D = \cos^2(\delta_s - \delta_a). \quad (2.88b)$$

Das Verhalten dieser Funktionen im Resonanzbereich ist in Abb. 14 skizziert.

Wir betrachten die Zeitentwicklung eines Wellenpaketes

$$\Psi(x, t=0) = \int A(k-k_0) \psi_k^{(+)}(x) dk \quad (2.89)$$

mit einer reellen, bei $k=k_0$ scharf gepeakten Funktion $A(k-k_0)$. Zur Zeit t folgt mit dem Zeitentwicklungsoperator

$$U(t) = e^{-\frac{i\hbar t}{\hbar}} \quad (2.90)$$

und der Eigenwertgleichung für $\psi_k^{(+)}(x)$

$$\Psi(x,t) = \int dk A(k-k_0) e^{-\frac{iE(k)t}{\hbar}} \psi_k^{(+)}(x). \quad (2.91)$$

Das Wellenpaket

$$\chi(x) = \int A(k-k_0) e^{ikx} dk \quad (2.92a)$$

$$= e^{ik_0 x} \int A(q) e^{iqx} dq \quad (2.92b)$$

mit

$$q = k - k_0 \quad (2.93)$$

ist bei $\lambda=0$ konzentriert. ⁺⁾

Bei genügend schmalem $A(q)$ darf man in Gleichung (2.91) $E(k)$ und die Phasen μ und ν von $\tau(k)$ und $d(k)$ linear um $k=k_0$ entwickeln und die Beträge bei $k=k_0$ einsetzen. Dann ergibt sich mit

⁺⁾ $\chi(0)$ ist die Fläche unter der Kurve $A(q)$. Mit wachsendem x oszillieren sich positive und negative Anteile in Real- und Imaginärteil zunehmend weg.

den Gleichungen (2.3b), (2.9b) (2.86) und mit der Gruppengeschwindigkeit

$$u = \frac{\hbar k_0}{m} \quad (2.94)$$

asymptotisch für große $|x|$

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) = & e^{i(k_0 x - \frac{E(k_0)t}{\hbar})} \chi(x-ut) \\ & + r(k_0) e^{-i(k_0 x + \frac{E(k_0)t}{\hbar})} \chi(-x-ut + \phi_r'(k_0)) \end{aligned} \quad (2.95)$$

für $x < 0$,

$$\Psi(x,t) = e^{i(k_0 x - \frac{E(k_0)t}{\hbar})} d(k_0) \chi(x-ut + \phi_d'(k_0)) \quad (2.96)$$

für $x > 0$.

Für $t < 0$ ist $\Psi(x,t)$ asymptotisch gleich dem einfallenden Wellenpaket mit Zentrum bei

$$x = ut, \quad (2.97)$$

für $t > 0$ und $x < 0$ gleich dem reflektierten Wellenpaket bei

$$x = -ut + \phi_r'(k_0) \quad (2.98a)$$

$$= -u \left(t + \frac{1}{u} \phi_r'(k_0) \right) \quad (2.98b)$$

für $t > 0$ und $X > 0$ gleich dem durchgelassenen Wellenpaket bei

$$x = ut - \phi_a'(k_0) \quad (2.99a)$$

$$= u \left(t - \frac{1}{u} \phi_a'(k_0) \right). \quad (2.99b)$$

Das reflektierte Wellenpaket wird nach Gleichung (2.98a) scheinbar bei

$$x = \phi_r'(k_0) \quad (2.100)$$

oder nach Gleichung (2.98b) mit einer Verzögerungszeit

$$t_d = \frac{1}{u} \phi_r'(k_0) = \frac{1}{u} \cdot \frac{\partial \phi_r}{\partial E} \quad (2.101)$$

emittiert. Analoges gilt für das transmittierte Wellenpaket.

Nach den Gleichungen (2.87a-b) gilt

$$\phi_r = \delta_s + \delta_a + \frac{\pi}{2} \quad (2.102a)$$

$$\phi_d = \delta_s + \delta_a. \quad (2.102b)$$

Bei Resonanzstreuung ändert sich eine der Phasen δ in einem kleinen Energiebereich sehr schnell. Die Formel (2.101) ist dann also nur für die Streuung eines energetisch sehr schmalen Wellenpakets richtig. Es ergeben sich dann sehr große Verzögerungszeiten. Für das Zentrum der Resonanz $E = E_r$ wird nach Gleichung (2.80)

$$t_d = \frac{2\hbar}{\Gamma}. \quad (2.103)$$

Die große Verzögerungszeit bei Resonanzstreuung läßt sich anschaulich verstehen, wenn man die Lösungen $\psi_i^k(x)$ als Funktionen von x im Zentrum der Resonanz und außerhalb der Resonanz betrachtet. In Abb. 15 sind die antisymmetrischen Streulösungen zu dem im vorigen Abschnitt behandelten Modellpotential für $k = k_p' (\approx \frac{\pi}{2a})$ und für $k = \frac{\pi}{2a}$ dargestellt. Die Amplitude A_i innerhalb des Potentials ist also in der Resonanz groß gegenüber der Amplitude A_a außerhalb des Potentials. Für unser Beispiel gilt im Bereich der niedrigsten antisymmetrischen Resonanz (Abb. 16)

$$\left| \frac{A_i}{A_a} \right|^2 = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\Gamma E_r}{(E - E_r)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}. \quad (2.104)$$

Außerhalb der Resonanz dringt das Teilchen nur wenig in das Potential ein. In der Resonanz jedoch wird es in einen beinahe gebundenen Zustand im Innern des Potentials eingefangen und stark verzögert emittiert.

Bei einem Potential nach Abb.20, das nach links durch eine unendlich hohe Potentialwand begrenzt ist, gibt es keine durchgelassene Welle. Die Amplitude der reflektierten Welle hat daher immer den gleichen Betrag wie die Amplitude der einfallenden Welle. Zu jeder Energie gibt es nur eine Streulösung, die asymptotisch lautet

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (e^{-ikx} + R(k) e^{ikx}), \quad R(k) = S(k). \quad (2.105)$$

Die S-Matrix ist zu einer Zahl entartet. Im Streuverhalten äußert sich die Resonanz nur durch die Verzögerungszeit.

3) Zeitentwicklung eines metastabilen Zustandes

Die in den beiden vorigen Abschnitten gewonnenen Ergebnisse wollen wir nun auf das Problem der Zeitentwicklung eines metastabilen Zustandes anwenden. Wir beschränken uns zunächst wieder auf ein eindimensionales System mit symmetrischem Potential. Als Anfangszustand wählen wir zunächst einen beliebigen innerhalb des Potentials lokalisierten Zustand φ_i . Mit der Spektraldarstellung des Zeitentwicklungsoperators (2.90) gilt für die Wahrscheinlichkeitsamplitude, das System zur Zeit t im Zustand φ_i zu finden

$$\begin{aligned} (\varphi_i, \psi(t)) &= (\varphi_i, U(t) \varphi_i) \\ &= \sum_{l=q_1}^{\infty} \int_0^{\infty} dk e^{-\frac{iE(k)t}{\hbar}} (\varphi_i, \psi_e^k) (\psi_e^k, \varphi_i) \\ &\quad + \sum_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} (\varphi_i, \psi_n) (\psi_n, \varphi_i). \end{aligned} \tag{2.106}$$

Die Funktionen $\psi_0^k(x)$ sind die symmetrischen, die Funktionen $\psi_1^k(x)$ die antisymmetrischen normierten Streulösungen ⁺⁾

$$(\psi_e^k, \psi_e^{k'}) = \delta(k-k') \delta_{ee'} \tag{2.107}$$

und die Funktionen ψ_n die gebundenen Zustände

$$\mathcal{H} \psi_n = E_n \psi_n \quad (\psi_n, \psi_{n'}) = \delta_{nn'}. \tag{2.108}$$

⁺⁾ Die Zerlegung nach symmetrischen und antisymmetrischen Streulösungen ist willkürlich. Man hätte ein beliebiges anderes System von Streulösungen, z.B. $\psi_k^{(+)}(x)$ oder $\psi_k^{(-)}(x)$ wählen können.

Wir formen das Integral in Gleichung (2.106) durch komplexe Integration über den Weg in Abb. 17 um. Der Beitrag des Kreisbogens C_1 verschwindet wegen des Exponentialfaktors wie $e^{-|k|^2}$ außer wenn die Skalarprodukte im Integranden ebenso stark anwachsen. Für das Modellpotential (2.57) werden wir in Anhang A sehen, daß dies nicht der Fall ist. Es bleiben die Anteile der Resonanzpole und der Geraden C_0 .

Mit den Polstellen k_p^ℓ von $S_\ell(k)$ ($E_p^\ell = E(k_p^\ell)$) und $\psi_\ell^k(x)$ nach (2.45) und (2.50) gilt dann

$$\begin{aligned} (\varphi_i, \psi(t)) = & \\ = 2\pi i \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{k_p^\ell} (-1)^\ell e^{-\frac{iE_p^\ell t}{\hbar}} (\varphi_i, f_\ell(k_p^\ell, x)) (f_\ell(-k_p^\ell, x), \varphi_i) \operatorname{Res}_{k_p^\ell} S_\ell(k) \\ & + \sum_n |(\varphi_i, \psi_n)| e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} + \sum_{\ell=0}^{\infty} J_\ell, \end{aligned} \quad (2.109)$$

$$J_\ell = \int dk e^{-\frac{iE(k)t}{\hbar}} (\varphi_i, \psi_\ell^k) (\psi_\ell^k, \varphi_i). \quad (2.109a)$$

Wegen des negativen Imaginärteils der Energien E_p^ℓ ist der erste Term auf der rechten Seite von Gleichung (2.109) eine Summe von zeitlich abfallenden Exponentialfunktionen mit oszillierenden Faktoren. Wegen der unterschiedlichen Zerfallszeiten bleibt nach einiger Zeit nur noch der am langsamsten zerfallende Anteil übrig. Das ist der Anteil mit minimalem $\operatorname{Im} E_p^\ell$ und nicht verschwindendem Faktor $(\varphi_i, f_\ell(k_p^\ell, x)) (f_\ell(-k_p^\ell, x), \varphi_i)$.

Man will nun φ_i so festlegen, daß die Zeitentwicklung für alle Zeiten möglichst einfach wird. Wählt man φ_i orthogonal zu den schneller zerfallenden Resonanzzuständen, so bleibt schon für kleine Zeiten nur der am langsamsten zerfallende Anteil übrig.

Die Funktionen $f_i(\pm k_p, x)$ sind innerhalb des Potentials ähnlich gebundenen Zuständen zu einem Potential $\hat{V}(x)$, das sich von $V(x)$ nur durch bei der Energie $Re E_p$ undurchdringliche Potentialwände (z.B. unendlich hoch oder unendlich breit) unterscheidet.

In dem Modellpotential (2.57) kann man $\hat{V}(x)$ etwa durch den Grenzübergang $\alpha \rightarrow \infty$ definieren. Die Funktionen $f_i(\pm k_p, x)$ zu verschiedenen k_p sind daher nahezu orthogonal, wenn man sie am Rande des Potentials abschneidet. Um ein fast rein exponentielles Verhalten des ersten Terms in Gleichung (2.109) zu erhalten, muß man daher φ_i im Innern des Potentials ähnlich der am langsamsten zerfallenden Resonanzfunktion wählen. Außen kann φ_i abgeschnitten sein oder z.B. exponentiell abfallen, wobei der Hauptanteil von φ_i innerhalb des Potentials liegen muß. Die Funktion φ_i kann auch als Eigenzustand zu einem Potential $\hat{V}(x)$ von der oben beschriebenen Art gewählt werden.

Auch der zweite Term in Gleichung (2.109) liefert bei dieser Wahl von φ_i einen Beitrag der klein gegen eins ist, da die gebundenen Zustände ψ_n zu $V(x)$ sich nur wenig von den gebundenen Zuständen zu $\hat{V}(x)$ unterscheiden, die orthogonal zu φ_i sind.

Bis auf Terme der Größenordnung eins gilt für das Potential (2.57) nach (2.50), (2.61) und (2.69) bis auf Terme der Größenordnung eins

$$f_e(\pm k_p, x) = \frac{-\alpha}{\sqrt{\pi} k_p} \sin k_p x \quad \text{für } |x| < a \quad (2.110)$$

mit k_p nach Gleichung (2.72) und (2.75). Wir wählen φ_i ähnlich der niedrigsten antisymmetrischen Resonanzfunktion

$$\varphi_i(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{\pi x}{a} & \text{für } |x| \leq a \\ 0 & \text{für } |x| > a \end{cases} \quad (2.111)$$

Mit dieser Wahl beschränken wir uns auf den Unterraum der antisymmetrischen Eigenfunktionen.

Die Residuen der Funktion $S_a(k)$ sind nach (2.67)

$$\text{Res}_{k_p} S_a(k) = - \frac{2ik_p^2}{\alpha^2 a} \quad (2.112)$$

Aus (2.110) und (2.111) folgt

$$(\varphi_i(x), f_a(\pm k_p, x)) \approx - \frac{\alpha}{k_p \sqrt{a}}. \quad (2.113)$$

Für den niedrigsten Pol $k_p \approx \frac{\pi}{a} (1 - \frac{1}{\alpha a})$ folgt aus (2.113) und (2.112) durch Entwickeln des Sinus ⁺⁾

$$2\pi i |(\varphi_i, f_a(\pm k_p, x))|^2 \text{Res}_{k_p} S_a(k) \approx 1.$$

Für die höheren Pole ergibt sich

$$2\pi i |(\varphi_i, f_a(\pm k_p, x))|^2 \text{Res}_{k_p} S_a(k) \approx \frac{1}{\alpha^4 a^2} \frac{8(\frac{\pi}{a})^6}{((\frac{\pi}{a})^2 - k_p^2)^2} \ll 1.$$

Es gibt für unser Beispiel keinen Beitrag der gebundenen Zustände, da der einzige gebundene Zustand symmetrisch und daher orthogonal zu der antisymmetrischen Funktion φ_i ist.

Von den beiden ersten Termen in Gleichung (2.109) bleibt also nur die am langsamsten zerfallende Exponentialfunktion mit dem Faktor eins übrig.

⁺⁾ Die Betragsquadrate für komplexes k bedeuten im folgenden immer die analytischen Fortsetzungen der bei reellem k gebildeten Betragsquadrate.

Nach der Abschätzung in Anhang A ist der letzte Term in (2.109) für unser Beispiel von der Ordnung $(\alpha a)^{-2} \ll 1$.

Speziell für $t = 0$ folgt daraus nochmals

$$(\varphi_i, \psi(0)) = (\varphi_i, \varphi_i) = 1 \approx 2\pi i |(\varphi_i, f_a(\pm k_p, x))|^2 \operatorname{Res}_{k_p} s_a(k). \quad (2.114)$$

Damit bleibt für nicht zu große Zeiten für die Wahrscheinlichkeit, das System im Zustand φ_i zu finden, von Gleichung (2.109) übrig

$$|(\varphi_i, \psi(t))|^2 = e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (2.115)$$

mit der reziproken Zerfallszeit

$$\frac{1}{\tau} = -\frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} E_p = \frac{\Gamma}{\hbar} = -\frac{2\hbar}{m} \operatorname{Re} k_p \operatorname{Im} k_p. \quad (2.116)$$

Wenn wir annehmen, daß die Abschätzung nach Anhang A qualitativ auch für allgemeinere Potentiale richtig bleibt, so gilt auch das Ergebnis (2.115) allgemein für Potentiale mit Resonanzen.

Für unser Beispiel gilt

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\hbar}{m} \cdot \frac{\left(\frac{\Gamma}{a}\right)^3}{\alpha^2 a} \quad (2.117)$$

Für große Zeiten kann man über das Verhalten des letzten Terms in Gleichung (2.109) qualitativ folgendes aussagen. Wegen des schnellen Abfalls der Exponentialfunktion braucht man bei großem t den Ausdruck $(\varphi_i, \psi_e^k)(\psi_e^k, \varphi_i)$ nur für kleine k . Nach (2.46) und (2.51) gilt

$$s_s(k) \rightarrow -1 \quad \text{und} \quad s_a(k) \rightarrow +1 \quad \text{für } k \rightarrow 0. \quad (2.118)$$

Das bedeutet nach (2.45) und (2.50)

$$\psi_e^k(x) \rightarrow 0 \quad \text{für } k \rightarrow 0. \quad (2.119)$$

Daher ist $|\langle \varphi_i, \psi_e^k \rangle|^2$ proportional zu k^2 für kleine k . Mit der Substitution

$$k \sqrt{\frac{\hbar t}{2m}} = e^{-\frac{i\pi}{4}} \sqrt{u} \quad (2.120)$$

findet man daher für das Integral in (2.109)

$$J_e \sim \int dk k^2 e^{-\frac{i\hbar k^2 t}{2m}} \sim \frac{1}{t^{3/2}}. \quad (2.121)$$

Wir wollen nun die Zeitentwicklung noch einmal in einem anderen Formalismus beschreiben, der, insbesondere zusammen mit dem im nächsten Abschnitt dargestellten Formalismus, auch für kompliziertere, z.B. feldtheoretische, Zerfallsprobleme geeignet ist. Für die Zeitentwicklung eines Anfangszustandes $\psi(t=0) = \varphi_i$ gilt⁺

$$\psi(t) = \Theta(t) e^{-\frac{i\hbar t}{\hbar}} \varphi_i \quad (2.122)$$

mit

$$\Theta(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < 0 \\ 1 & \text{für } t \geq 0. \end{cases} \quad (2.123)$$

Wie man durch komplexe Integration über die in Abb. 18 dargestellten

⁺) Da wir uns nur für die Zeitentwicklung in die Zukunft interessieren ($t > 0$), können wir die Vergangenheit durch den Faktor $\Theta(t)$ unterdrücken.

Wege C_1 (für $t > 0$) und C_2 (für $t < 0$) sieht, gilt

$$\psi(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-\frac{iEt}{\hbar}} G(E+i\varepsilon) \varphi_i, \quad \varepsilon \rightarrow +0 \quad (2.124)$$

mit der totalen Greenschen Funktion

$$G(E) = \frac{1}{E - \mathcal{H}} \quad \text{für komplexes } E. \quad (2.125)$$

Die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, daß das System zur Zeit t noch im Zustand φ_i gefunden wird, ist

$$(\varphi_i, \psi(t)) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-\frac{iEt}{\hbar}} (\varphi_i, G(E+i\varepsilon) \varphi_i). \quad (2.126)$$

Es ist plausibel, daß die S-Matrix für allgemeinere zerfallende Systeme ein analoges analytisches Verhalten hat wie in unserem eindimensionalen Beispiel mit symmetrischem Potential. Wegen des Zusammenhanges

$$G = G_0 + G_0 T G_0 \quad (2.127)$$

und wegen (2.24) hängt das Matrixelement $(\varphi_i, G(E) \varphi_i)$ linear mit der S-Matrix zusammen.

Wir nehmen für unser System an, daß die S-Matrix und damit auch das Matrixelement $(\varphi_i, G(E) \varphi_i)$ eine zweiblättrige Riemannsche E-Fläche mit Verzweigungspunkt bei $E=0$ hat.

Die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators $\mathcal{H}$ seien durch ihre Energie E und einen Satz S von weiteren Quantenzahlen charakterisiert und orthonormiert

$$\mathcal{H}\psi_{E,S} = E\psi_{E,S} \quad (\psi_{E,S}, \psi_{E',S'}) = \delta_{EE'} \delta_{SS'}. \quad (2.128)$$

Für kontinuierliche Quantenzahlen soll das Kroneckersymbol in (2.128) durch die δ -Funktion ersetzt werden. Damit lautet die Spektraldarstellung des Matrixelements
(E_n diskrete Eigenwerte)

$$\begin{aligned} & (\varphi_i, G(E)\varphi_i) \\ &= \sum_{n,S} \frac{|(\varphi_i, \psi_{E_n,S})|^2}{E - E_n} + \sum_S \int_0^\infty dE' \frac{|(\varphi_i, \psi_{E',S})|^2}{E - E'}. \end{aligned} \quad (2.129)$$

Als Summe und Integral über Funktionen, die in Abhängigkeit von E analytisch sind, ist das Matrixelement analytisch als Funktion von E . Bei $E = E_n$ liegen einfache Pole mit den Residuen

$$\sum_S |(\varphi_i, \psi_{E_n,S})|^2. \quad (2.130)$$

Beim Überschreiten der positiv reellen Achse springt die Funktion um den Wert

$$\begin{aligned} & (\varphi_i, [G(E+i\varepsilon) - G(E-i\varepsilon)]\varphi_i) = \\ &= \sum_S \int_0^\infty dE' |(\varphi_i, \psi_{E',S})|^2 \left(\frac{1}{E+i\varepsilon-E'} - \frac{1}{E-i\varepsilon-E'} \right). \end{aligned} \quad (2.131)$$

Wegen (2.23) gilt dann

$$(\varphi_i, [G(E-i\varepsilon) - G(E+i\varepsilon)] \varphi_i) = 2\pi i \sum_s |(\varphi_i, \psi_{E,s})|^2. \quad (2.132)$$

Setzt man die Funktion $(\varphi_i, G(E-i\varepsilon) \varphi_i)$ über die reelle Achse hinaus in die obere Halbebene analytisch fort, so erhält man das 2. Riemannsche Blatt der Greenschen Funktion. Bezeichnet man mit G^I bzw. G^{II} die Greensche Funktion im 1. bzw. 2. Riemannschen Blatt, so gilt nach (2.132) wegen

$$(\varphi_i, G^{II}(E+i\varepsilon) \varphi_i) = (\varphi_i, G^I(E-i\varepsilon) \varphi_i)$$

$$(\varphi_i, G^{II}(E) \varphi_i) = (\varphi_i, G^I(E) \varphi_i) + 2\pi i \sum_s (\varphi_i, \psi_{E,s})(\psi_{E,s}, \varphi_i). \quad (2.133)$$

Dabei bedeutet der zweite Term rechts die analytische Fortsetzung der rechten Seite von (2.132), wobei ausgehend von der positiv reellen Achse der Verzweigungspunkt bei $E=0$ entgegengesetzt dem Uhrzeigersinn umlaufen wird.

Wir verziehen den Integrationsweg des Integrals in (2.124) wegen des Faktors e^{-iEt} in die untere Halbebene. Das Wegstück längs der negativ reellen Achse drehen wir in die negativ imaginäre Achse. Das Wegstück längs der positiv reellen Achse verschieben wir über den Schnitt in das zweite Riemannsche Blatt und drehen es ebenfalls in die negativ imaginäre Achse. Außer dem Beitrag des deformierten Weges C ergeben sich Anteile von den Resonanzpolen im zweiten Blatt und gegebenenfalls von gebundenen Zuständen auf der negativ reellen Achse (Abb. 19). Es folgt also wegen (2.129) aus (2.126)

$$\begin{aligned}
 (\varphi_i, \psi(t)) &= \sum_P \operatorname{Res}_{E_P} (\varphi_i, G(E) \varphi_i) e^{-\frac{i E_P t}{\hbar}} \\
 &\quad + \sum_n \sum_s e^{-\frac{i E_n t}{\hbar}} \\
 &\quad + \frac{i}{2\pi} \int_C dE e^{-\frac{i E t}{\hbar}} (\varphi_i, G(E) \varphi_i). \quad (2.134)
 \end{aligned}$$

Dabei ist wegen (2.133)

$$\operatorname{Res}_{E_P} (\varphi_i, G(E) \varphi_i) = \operatorname{Res}_{E_P} 2\pi i \sum_s (\varphi_i, \psi_{E,s}) (\psi_{E,s}, \varphi_i) \quad (2.135)$$

das Residuum zum Pol E_P . Wählt man im Bereich der Wechselwirkung die Funktion φ_i wieder gleich einer Resonanzfunktion, so ist diese nach ähnlichen Überlegungen wie oben nahezu orthogonal zu den Resonanzzuständen mit anderer Energie und zu den gebundenen Zuständen. Das Integral über C führen wir für den Fall des eindimensionalen symmetrischen Potentials auf das Integral über C_0 in Abb. 17 zurück.

Wegen (2.133) gilt

$$\begin{aligned}
 &\frac{i}{2\pi} \int_C dE e^{-\frac{i E t}{\hbar}} (\varphi_i, G(E) \varphi_i) \\
 &= \int_{-i\infty}^0 dE e^{-\frac{i E t}{\hbar}} \sum_s (\varphi_i, \psi_{E,s}) (\psi_{E,s}, \varphi_i). \quad (2.136)
 \end{aligned}$$

Wegen der verschiedenen Normierung der Funktionen $\psi_{E,s}$ und ψ_e^k (Gleichungen (2.107) und (2.128) gilt

$$\psi_{E,s} = \sqrt{\frac{m}{\hbar^2 k}} \psi_e^k. \quad (2.137)$$

Da die Integrationsgrenzen bei der Substitution

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad dE = \frac{\hbar^2 k}{m} dk \quad (2.138)$$

in $e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$ bzw. Null übergehen, ist

$$\begin{aligned} & \frac{i}{2\pi} \int_C dE e^{-\frac{iEt}{\hbar}} (\varphi_i, G(E) \varphi_i) \\ &= \int_{C_0} dk e^{-\frac{iE(k)t}{\hbar}} \sum_e (\varphi_i, \psi_e^k) (\psi_e^k, \varphi_i). \end{aligned} \quad (2.139)$$

Es gelten hier also dieselben Überlegungen wie oben, so daß wir wieder das Zerfallsgesetz (2.115) mit der Zerfallszeit (2.116) finden.

Statt der Wahrscheinlichkeitsamplitude $(\varphi_i, \psi(t))$ kann man auch die Übergangsamplituden $(\varphi_f, \psi(t))$ mit zu φ_i orthogonalen Funktionen φ_f betrachten. Im nächsten Abschnitt werden wir diese Beschreibung diskutieren und die Funktionen φ_f formal definieren.

4) Feshbach-Formalismus und Lee-Modell

Der im folgenden dargestellte Formalismus (Feshbach / 8 /) ist zur näherungsweise Berechnung der Zerfallszeit geeignet, wenn der optimale Anfangszustand φ_i leicht definierbar ist. Das ist bei vielen Modellen, z.B. feldtheoretischen, durch Abschalten einer Kopplung oft möglich. Ein Beispiel dafür ist die Lichtemission durch ein Atom. Durch Abschalten der Kopplung zwischen elektromagnetischem Feld und Atom findet man φ_i als angeregten Zustand des Atoms. Ein anderes Beispiel ist die Auto-Ionisation des Helium-Atoms, bei der man φ_i als Eigenzustand des Hamiltonoperators mit abgeschalteter Kopplung zwischen den beiden Elektronen definieren kann.

Bei Problemen der Potentialstreuung liefert der Formalismus höchstens zufällig das richtige Ergebnis, wenn man den Anfangszustand φ_i richtig rät. Ein Beispiel dafür werden wir in Kapitel IV diskutieren.

Wir nehmen an, daß die Zustandsfunktion φ_i als exakte Eigenfunktion eines Hamiltonoperators $\mathcal{H}_i$ definiert ist

$$\mathcal{H}_i \varphi_i = E_i \varphi_i. \quad (2.140)$$

Gibt man sich statt eines Hamiltonoperators die Funktion φ_i und die Energie E_i vor, so kann man definieren

$$\mathcal{H}_i = |\varphi_i\rangle E_i \langle \varphi_i|. \quad (2.141)$$

Als Energie E_i kann man zum Beispiel $\langle \varphi_i | \mathcal{H} | \varphi_i \rangle$ wählen.

Mit den Projektionsoperatoren

$$P = |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| \quad (2.142a)$$

und $Q = 1 - P$ (2.142b)

läßt sich die Gleichung

$$(E - \mathcal{H}) G(E) = 1 \quad (2.143)$$

in der Form

$$(E - \mathcal{H})(P + Q) G(E)(P + Q) = 1 \quad (2.144)$$

schreiben. Wir multiplizieren (2.144) von links und rechts mit P

$$(E - P\mathcal{H}P) PGP - P\mathcal{H}QGP = P \quad (2.145)$$

und dann von links mit Q , von rechts mit P

$$(E - Q\mathcal{H}Q) QGP - Q\mathcal{H}PGQ = 0. \quad (2.146)$$

Es folgt aus (2.146)

$$QGP = G_Q \mathcal{H}PGP \quad (2.147)$$

mit $G_Q = \frac{Q}{E - Q\mathcal{H}Q}.$ (2.148)

Einsetzen von (2.147) in (2.145) liefert

$$[E - E_i - (\varphi_i, V_i \varphi_i)] P G P - P \mathcal{H} G_Q \mathcal{H} P G P = P \quad (2.149)$$

mit $V_i = \mathcal{H} - \mathcal{H}_i$. (2.150)

Aus (2.149) folgt

$$(\varphi_i, G(E) \varphi_i) = \frac{1}{E - E_i - (\varphi_i, V_i \varphi_i) - (\varphi_i, \mathcal{H} G_Q(E) \mathcal{H} \varphi_i)} . \quad (2.151)$$

Es gilt

$$\begin{aligned} (\varphi_i, \mathcal{H} G_Q(E) \mathcal{H} \varphi_i) &= (\varphi_i, [E + V_i] G_Q(E) [E + V_i] \varphi_i) \\ &= (\varphi_i, V_i G_Q(E) V_i \varphi_i) \end{aligned} \quad (2.152)$$

wegen

$$G_Q \varphi_i = 0 .$$

Damit ist

$$(\varphi_i, G(E) \varphi_i) = \frac{1}{E - E_i - (\varphi_i, R(E) \varphi_i)} . \quad (2.153)$$

$$(2.154)$$

Falls $(\varphi_i, R(E_i + i\varepsilon) \varphi_i) \ll \varepsilon$; $(\varepsilon \rightarrow 0)$ ist, gilt näherungsweise für den Resonanzpol

$$E_P = E_i + (\varphi_i, R(E_i + i\varepsilon) \varphi_i) . \quad (2.155)$$

Man muß hier für $R_i(E_i)$ den Wert oberhalb des Schnittes nehmen, da die Werte des Matrixelementes unterhalb der positiv reellen Achse im zweiten Blatt durch analytische Fortsetzung der Funktion oberhalb der positiv reellen Achse im ersten Blatt entsteht.

Nach (2.116) und (2.155) ist

$$\frac{1}{\tau} = -\frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} (\varphi_i, R(E_i + i\varepsilon) \varphi_i). \quad (2.156)$$

Wir zerlegen also das Matrixelement $(\varphi_i, R(E + i\varepsilon) \varphi_i)$ in Real- und Imaginärteil.

Wegen

$$G_Q(E + i\varepsilon) = \mathcal{P} \frac{Q}{E - Q\mathcal{H}Q} - i\pi \delta(E - Q\mathcal{H}Q) \quad (2.157)$$

gilt

$$\begin{aligned} (\varphi_i, R(E_i + i\varepsilon) \varphi_i) &= (\varphi_i, V_i \varphi_i) + (\varphi_i, V_i \mathcal{P} G_Q(E_i) V_i \varphi_i) \\ &\quad - i\pi (\varphi_i, V_i \delta(E_i - Q\mathcal{H}Q) Q V_i \varphi_i). \end{aligned} \quad (2.158)$$

Es seien

$$Q\mathcal{H}Q \varphi_{f,E,\lambda} = E \varphi_{f,E,\lambda} \quad (2.159)$$

die Eigenzustände von $Q\mathcal{H}Q$ zur Energie E . λ bezeichnet einen Satz von weiteren Quantenzahlen neben der Energie. Dann gilt

$$\begin{aligned}
 (\varphi_i, V_i \delta(E_i - Q H Q) Q V_i \varphi_i) &= \\
 &= \sum_{\lambda} \int dE (\varphi_i, V_i \delta(E_i - E) \varphi_{f,E,\lambda}) (\varphi_{f,E,\lambda}, V_i \varphi_i) \rho_{\lambda}(E_i).
 \end{aligned}
 \tag{2.160}$$

Darin ist $\rho_{\lambda}(E_i)$ die Dichte der Zustände φ_f mit den Quantenzahlen λ (Bei E-Normierung: $\rho_{\lambda} = 1$). Damit ist nach (2.156)

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\lambda} |(\varphi_{f,E_i,\lambda}, V_i \varphi_i)|^2 \rho_{\lambda}(E_i).
 \tag{2.161}$$

Dieser Ausdruck entspricht der "Goldenen Regel" für den Übergang aus einem Zustand φ_i in Zustände $\varphi_{f,E,\lambda}$. Die Zustände $\varphi_{f,E,\lambda}$ sind orthogonal zu φ_i als Eigenzustände des Operators QHQ , der in einem zu φ_i orthogonalen Raum wirkt.

Jetzt können wir den Zerfall des Zustandes φ_i auch als Übergang in die Zustände φ_f beschreiben.

Die Übergangsamplitude vom Zustand φ_i in einen Zustand $\varphi_{f,E,\lambda}$ ist nach (2.124) (Wir lassen die Indizes E_f, λ in den Zwischenrechnungen weg):

$$(\varphi_f, \psi(t)) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} (\varphi_f, G(E + i\varepsilon) \varphi_i) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} dE.
 \tag{2.162}$$

Für das Matrixelement

$$(\varphi_f, G(E) \varphi_i) = (\varphi_f, Q G(E) P \varphi_i)
 \tag{2.163}$$

gilt nach Gleichung (2.147)

$$\begin{aligned}
 (\varphi_f, G(E) \varphi_i) &= (\varphi_f, \frac{Q}{E - Q \mathcal{H} Q} \mathcal{H} \varphi_i) (\varphi_i, G(E) \varphi_i) \\
 &= (\varphi_f, \frac{1}{E - E_f} (E_i + V_i) \varphi_i) (\varphi_i, G(E) \varphi_i)
 \end{aligned}$$

und mit $(\varphi_f, \varphi_i) = 0$

$$(\varphi_f, G(E) \varphi_i) = \frac{(\varphi_f, V_i \varphi_i) (\varphi_i, G(E) \varphi_i)}{E - E_f} \quad (2.164)$$

Das Integral (2.162) lässt sich damit analog zum Integral (2.126) auswerten. Es ergibt sich für nicht zu große Zeiten wegen des zusätzlichen Poles für $E = E_f$

$$\begin{aligned}
 (\varphi_f, \psi(t)) &= \frac{(\varphi_{f,E_f}) V_i \varphi_i) e^{-i \frac{E_f t}{\hbar}}}{E_f - E_i - (\varphi_i, R(E_f + i\varepsilon) \varphi_i)} + \\
 &+ \frac{e^{-i \frac{E_f t}{\hbar}} (\varphi_{f,E_i}) V_i \varphi_i)}{E_i + (\varphi_i, R(E_i + i\varepsilon) \varphi_i) - E_f} \quad (2.165)
 \end{aligned}$$

Wenn der Beitrag von $(\varphi_i, R(E_i + i\varepsilon) \varphi_i)$ klein und langsam veränderlich mit der Energie ist ("schmale Resonanz") gibt es wesentliche Beiträge nur für $E_i = E_f$. Daraus folgt

$$\begin{aligned}
 &(\varphi_{f,E_f}) \psi(t) \\
 &= \frac{(\varphi_{f,E_f}) V_i \varphi_i) e^{-i \frac{E_f t}{\hbar}}}{E_f - E_i - (\varphi_i, R^+(E_i + i\varepsilon) \varphi_i)} \left(1 - e^{\frac{i}{\hbar} (E_f - E_i) t} \right) \quad (2.166)
 \end{aligned}$$

Quadrieren und Integrieren über E_f liefert für den insgesamt zerfallenen Anteil von φ_i

$$\begin{aligned} w(t) &= \sum_{\lambda} \int dE_f |(\varphi_f)_{E_f, \lambda}, \psi(t)|^2 \\ &= \frac{2\pi\tau}{\hbar} \sum_{\lambda} g_{\lambda}(E_i) |(\varphi_f)_{E_i, \lambda}, V_i \varphi_i|^2 (1 - e^{-\frac{t}{\tau}}), \end{aligned} \quad (2.167)$$

oder wegen (2.161)

$$w(t) = 1 - e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (2.168)$$

Als einfachstes Beispiel für die Anwendung des Feshbach-Formalismus betrachten wir das eindimensionale Lee-Modell. Der Hamilton-Operator besteht aus drei Anteilen

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_n + \mathcal{H}_f + W. \quad (2.169)$$

Der Operator $\mathcal{H}_n$ beschreibt ein am Ort $x=0$ festliegendes Teilchen, das wir "Nukleon" nennen. Das Nukleon hat zwei Zustände, die durch zweidimensionale Zustandsvektoren dargestellt werden können:

- 1) "Proton": Zustandsvektor $\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, Energie $\varepsilon = 0$
- 2) "Neutron": Zustandsvektor $\beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, Energie $\varepsilon = \varepsilon_n > 0$.

Mit dem Operator

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.170)$$

ist dann

$$\mathcal{H}_n = \frac{1 - \sigma_z}{2} \varepsilon_n . \quad (2.171)$$

Der Operator

$$\sigma = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.172)$$

verwandelt ein Neutron in ein Proton

$$\sigma \beta = \alpha \quad , \quad \sigma \alpha = 0 . \quad (2.173)$$

Der Operator

$$\sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.174)$$

erzeugt ein Neutron aus einem Proton

$$\sigma^+ \alpha = \beta \quad \sigma^+ \beta = 0 . \quad (2.175)$$

Der Operator

$$\mathcal{H}_F = \int dx \frac{\hbar^2}{2m} \psi^{+ \prime}(x) \psi'(x) = \int dx \psi^+(x) L(x) \psi(x) \quad (2.176)$$

mit

$$L(x) = - \frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \quad (2.177)$$

beschreibt ein Feld von Teilchen, zu deren Erzeugung keine Energie nötig ist ¹⁾. Für ψ^+ , ψ gelten die Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} [\psi(x), \psi^+(\bar{x})] &= \delta(x - \bar{x}) \\ [\psi(x), \psi(\bar{x})] &= 0 \\ [\psi^+(x), \psi^+(\bar{x})] &= 0. \end{aligned} \quad (2.178)$$

$\psi^+(x)$ erzeugt, $\psi(x)$ vernichtet ein Feldteilchen am Ort x .
Der Wechselwirkungsoperator

$$W = g (\psi^+(0) \sigma + \psi(0) \sigma^+) \quad (2.179)$$

mit der Kopplungskonstante g kommutiert mit dem Operator der Gesamt-Teilchenzahl

$$N = N_F + N_m = \int dx \psi^+(x) \psi(x) + \frac{1 - \sigma_z}{2}. \quad (2.180)$$

Dabei wurde dem Proton die Teilchenzahl $N_m = 0$ und dem Neutron die Teilchenzahl $N_m = 1$ zugeordnet. Wegen $[N, W] = 0$ ist $[N, H] = 0$. Man kann also Eigenzustände von H zu vorgegebener Gesamt-Teilchen-

¹⁾ Soll für die Erzeugung eines Teilchens die Energie ϵ_m nötig sein, so muß in (2.176) der Term $\epsilon_m \int dx \psi(x) \psi^+(x)$ ergänzt werden.

zahl finden. Wir beschränken uns auf den Unterraum mit der Teilchenzahl $N=1$.

Sei ϕ_0 der Vakuumzustand des Feldes, dann ist

$$\phi_0(x) = \alpha \psi^\dagger(x) \phi_0$$

der Zustand mit einem Feldteilchen am Ort x und dem Nukleon im Proton-Zustand. $\phi_{10} = \beta \phi_0$ ist der Zustand ohne Feldteilchen mit dem Nukleon im Neutron-Zustand. Der allgemeine Zustand ϕ mit $N=1$ ist eine Linearkombination der Zustände ϕ_{10} und $\phi_0(x)$

$$\phi = c \phi_{10} + \int dx \varphi(x) \phi_0(x) \quad (2.181)$$

Wie man leicht aus den Eigenschaften von $\sigma, \sigma^\dagger$ und den Vertauschungsrelationen für $\psi(x), \psi^\dagger(x)$ sieht, haben die Bestandteile des Hamiltonoperators die in den folgenden Gleichungen dargestellte Wirkung auf ϕ_{10} und $\phi_0(x)$:

$$\mathcal{H}_n \phi_{10} = \varepsilon_n, \quad \mathcal{H}_F \phi_{10} = 0, \quad W \phi_{10} = g \phi_0(0), \quad (2.182)$$

$$(2.183)$$

Wird das System in den Anfangszustand $\varphi_i = \phi_{10}$ (Neutron ohne Feldteilchen) gebracht, so zerfällt dieser unter dem Einfluß der Wechselwirkung W langsam in ein Proton und ein Feldteilchen. ϕ_{10} ist Eigenzustand zu $\mathcal{H}_n$ bzw. zu PHP mit $P = |\phi_{10}\rangle \langle \phi_{10}|$ jeweils mit der Energie $E_i = \varepsilon_n$.

Wir berechnen nun für schwache Kopplung die Zerfallszeit mit dem Feshbach-Formalismus.

Wegen $QHQ = \mathcal{H}_F$ sind die Endzustände $\varphi_f(k)$ gleich den Eigenzuständen von $\mathcal{H}_F$

$$\varphi_f(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{ikx} \phi_0(x) \quad (2.184)$$

mit
$$E_f(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.185)$$

Die Spektraldarstellung der Greenschen Funktion

$$G_Q(E+i\varepsilon) = \frac{Q}{E+i\varepsilon - Q\mathcal{H}Q} \quad (2.186)$$

lautet

$$\begin{aligned} G_Q(E+i\varepsilon) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \frac{|\varphi_f(k')\rangle \langle \varphi_f(k')|}{E+i\varepsilon - E(k')} \\ &= \int dx dx' |\phi_0(x)\rangle \int dk' \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{e^{ik'(x-x')}}{E+i\varepsilon - E(k')} \langle \phi_0(x')| \end{aligned} \quad (2.187)$$

Das Integral über k' liefert die freie Greensche Funktion für eindimensionale Potentialstreu Probleme

$$G_Q(E) = \int dx dx' |\phi_0(x)\rangle \left(-\frac{mi}{\hbar^2 k} e^{ik|x-x'|} \right) \langle \phi_0(x')| \quad (2.188)$$

mit $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, $k > 0$ für E an der Oberkante des Schnittes im ersten Riemannschen Blatt.

Die Zerfallszeit ergibt sich aus dem Matrixelement

$$(\varphi_i, R\varphi_i) = \langle \phi_{10} | R | \phi_{10} \rangle = \langle \phi_{10} | W | \phi_{10} \rangle + \langle \phi_{10} | W G_Q W | \phi_{10} \rangle,$$

Mit (2.182) und (2.188) folgt

$$\langle \phi_{10} | R(E) | \phi_{10} \rangle = -g^2 \frac{m_i}{\hbar^2 k} \quad (2.189)$$

und damit für die Zerfallszeit

$$\frac{1}{\tau} = 2g^2 \frac{m}{\hbar^2 k_n} \quad (2.190a)$$

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \quad (2.190b)$$

Aus (2.161) folgt mit (2.184)

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\pm} |\langle \varphi_f(\pm k_n) | W | \phi_{10} \rangle| \frac{m}{\hbar^2 k_n} \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\pm} \frac{g^2}{2\hbar} \left| \int dx e^{\pm i k x} \langle \phi_0(x) | \phi_0(0) \rangle \right|^2 \frac{m}{\hbar^2 k_n} \\ &= \frac{2g^2 m}{\hbar^2 k_n} \end{aligned} \quad (2.191)$$

in Übereinstimmung mit (2.190).

Wir diskutieren nun die Zeitentwicklung nach dem am Ende von Abschnitt II.3 dargestellten Formalismus. Nach (2.153) und (2.189) gilt

$$(\varphi_i, G(E)\varphi_i) = \langle \phi_{i0} | G(E) | \phi_{i0} \rangle = \frac{1}{E - \varepsilon_n + \frac{i\mu^2}{\sqrt{E}}} \quad (2.192)$$

mit

$$\mu^2 = \frac{g^2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}}. \quad (2.193)$$

Außer dem Resonanzpol bei

$$E_p = \varepsilon_n - \frac{i\mu^2}{\sqrt{\varepsilon_n}} \quad (2.194)$$

hat die Greensche Funktion einen Pol zu einem gebundenen Zustand bei

$$E_g = - \frac{\mu^4}{\varepsilon_n^2}. \quad (2.195)$$

Nach (2.134) gilt nach näherungsweise Berechnung der Residuen mit (2.192) - (2.194)

$$\begin{aligned} (\varphi_i, \Psi(t)) &= \langle \phi_{i0} | \Psi(t) \rangle \\ &= e^{-\frac{iE_p t}{\hbar}} \\ &\quad - e^{-\frac{iE_g t}{\hbar}} \frac{2\mu^2}{\varepsilon_n^3} \\ &\quad + \underbrace{\frac{i}{2\pi} \int_C dE \frac{e^{-\frac{iEt}{\hbar}}}{E - \varepsilon_n + \frac{i\mu^2}{\sqrt{E}}}}_{\text{J}}. \end{aligned} \quad (2.196)$$

Wir schätzen das Integral J für alle Zeiten ab. Es gilt:

$$\begin{aligned}
 J &= \frac{i}{2\pi} \int_{-i\infty}^0 dE e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \left(\frac{1}{E - \varepsilon_n + \frac{\gamma^2}{\sqrt{E}}} - \frac{1}{E - \varepsilon_n - \frac{\gamma^2}{\sqrt{E}}} \right) \\
 &= \frac{\gamma^2}{\pi} \int_{-i\infty}^0 dE e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \frac{\sqrt{E}}{E(E - \varepsilon_n)^2 + \gamma^4} \quad (2.197)
 \end{aligned}$$

Mit $E = -i\gamma$ folgt wegen $e^{-\frac{\gamma t}{\hbar}} < 1$ für $\gamma > 0$

$$\begin{aligned}
 J &\leq \frac{\gamma^2}{\pi} \int_0^\infty d\gamma \left| \frac{\sqrt{\gamma}}{-i\gamma(i\gamma + \varepsilon_n)^2 + \gamma^2} \right| \\
 &= \frac{\gamma^2}{\pi} \int_0^\infty d\gamma \left| \frac{\sqrt{\gamma}}{i\gamma^3 + 2\gamma^2\varepsilon_n - i\gamma\varepsilon_n^2 + \gamma^4} \right| \\
 &< \frac{\gamma^2}{\pi} \int_0^\infty \left| \frac{1}{\sqrt{\gamma}(i(\gamma^2 - \varepsilon_n^2) + 2\gamma\varepsilon_n)} \right| d\gamma \\
 &= \frac{\gamma^2}{\pi} \int_0^\infty \frac{d\gamma}{\sqrt{\gamma}(\gamma^2 + \varepsilon_n^2)} \\
 &= \frac{\sqrt{2}\gamma^2}{\varepsilon_n^{3/2}} \ll 1 \quad (2.198)
 \end{aligned}$$

Nach (2.196) und (2.198) sind die Beiträge des Poles E_q und des Integrals J klein gegen eins. Sie werden also erst für sehr große Zeiten wesentlich, wenn der Beitrag des Resonanzpoles zerfallen ist.

III. Quantitative Berechnung scharfer Resonanzen

Die in der Einleitung nur unbefriedigend halbklassisch begründete Formel (1.1) wollen wir quantenmechanisch begründen, neu interpretieren und eine Gleichung für den Realteil des Resonanzpoles angeben.

Wir betrachten ein Teilchen in einem eindimensionalen Potential nach Abb. 20 ($V(x) = \infty$ für $x < 0$). Die Streulösungen zu diesem Potential wollen wir aus den Streulösungen zu den einfacher strukturierten Potentialen $V_1(x)$ und $V_2(x)$ nach Abb. 21a,b aufbauen. Das Potential $V_1(x)$, $V_2(x)$ stimmt links (rechts) des Punktes x_0 mit dem ursprünglichen Potential $V(x)$ überein, nach rechts (links) ist $V_1(x)$ ($V_2(x)$) konstant gleich $V(x_0)$.

Ein Teilchen mit der Energie

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (3.1)$$

im Potential $V_1(x)$ für $x < x_0$ bzw. im Potential $V_2(x)$ für $x > x_0$ die kinetische Energie

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - V(x_0). \quad (3.2)$$

Die Streulösungen an $V_2(x)$ beziehen wir auf ein Koordinatensystem x , die Streulösungen an $V_1(x)$ auf ein System x' , das gegenüber x um eine Strecke a nach rechts verschoben ist

$$x' = x - a. \quad (3.3)$$

Die Streulösung zur Energie E nach (3.1) an $V_1(x)$ mit von rechts einfallender Welle lautet asymptotisch ($k > 0$)

$$\psi_k^1(x) = d_1(-k) e^{-ik'x'} \quad \text{für } x < x_0 \quad (3.4a)$$

$$\psi_k^1(x) = e^{-ikx'} + r_1(-k) e^{ikx'} \quad \text{für } x' \rightarrow \infty. \quad (3.4b)$$

Die entsprechende Streulösung an $V_2(x)$ lautet

$$\psi_{-k}^2(x) = e^{-ik'x} + r_2(k) e^{ik'x} \quad \text{für } x > x_0. \quad (3.5)$$

Dabei hat $r_2(k)$ wegen der Undurchdringlichkeit des Potentials $V_2(x)$ den Betrag eins.

Wir zerschneiden das Potential $V(x)$ an der Stelle x_0 und ziehen die beiden entstehenden Teile um eine kleine Strecke auseinander, so daß bei x_0 eine schmale Stufe entsteht ($\bar{V}(x)$ in Abb. 21c).

Die Streulösungen $\psi_k(x)$ am Potential $\bar{V}(x)$ müssen nach den oben gegebenen Definitionen in der Stufe einerseits proportional zur Streulösung $\psi_k^1(x)$ ⁺⁾ , andererseits gleich einer Linearkombination zweier linear unabhängiger Streulösungen zu $V_1(x)$, z.B. $\psi_k^1(x)$ und $\psi_{-k}^{1*}(x)$, sein.

$$\psi_k(x) = \gamma \psi_{-k}^2(x) = \alpha \psi_{-k}^1(x) + \beta \psi_{-k}^{2*}(x) \quad (3.6)$$

($\alpha, \beta, \gamma = \text{const.}$).

Daraus ergibt sich mit (3.3), (3.4) und (3.5) durch Koeffizientenvergleich

⁺⁾ Wegen der Randbedingung $\psi_k^2(0) = 0$ gibt es zu gegebener Energie nur eine Streulösung an $V_2(x)$.

$$\alpha d_1(-k) e^{ik'a} = \gamma, \quad (3.7a)$$

$$\beta d_1^*(-k) e^{-ik'a} = \gamma \tau_2(k). \quad (3.7b)$$

Es folgt

$$\beta = \alpha \frac{d_1(-k)}{d_1^*(-k)} e^{2ik'a} \tau_2(k). \quad (3.8)$$

Für $X > X_0$ ist die Streulösung $\psi_k(x)$ durch die in (3.6) festgelegte Linearkombination von ψ_{-k}^* und ψ_{-k} gegeben, da $V(x)$ für $X > X_0$ mit $V_1(x)$ übereinstimmt und die Lösung durch die nach (3.7) gegebenen Anfangswerte bei X_0 eindeutig bestimmt ist. Fordert man insbesondere für $X \rightarrow \infty$ die normierte Form

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \{ e^{-ikx} + R(k) e^{ikx} \}, \quad (3.9)$$

so ist dadurch der gemeinsame Faktor von α und β in (3.8) festgelegt. Mit (3.8) und (3.4b) ergibt sich

$$R(k) = \frac{\tau_2(-k) d_1^*(-k) + d_1(-k) \tau_2(k) e^{2ik'a}}{d_1^*(-k) + d_1(-k) \tau_1^*(-k) \tau_2(k) e^{2ik'a}}, \quad (3.10a)$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{d_1(-k) e^{ik'a}}{d_1^*(-k) + d_1(-k) \tau_1^*(-k) \tau_2(k) e^{2ik'a}}. \quad (3.10b)$$

Geht man mit der Stufenbreite im Potential $\bar{V}(x)$ gegen Null, so geht (3.10) in die Größe $R(b)$ für das Potential $V(x)$ über.

Der Ausdruck auf der rechten Seite von (3.10) läßt sich mit Hilfe von Invarianzeigenschaften der Schrödingergleichung vereinfachen.

Die Streulösung an $V_1(x)$ mit von links einfallender Welle lautet asymptotisch

$$\psi_k^1(x) = e^{ik'x'} + r_1(k) e^{-ik'x'} \quad \text{für } x < x_0 \quad (3.11a)$$

$$\psi_k^1(x) = d_1(k) e^{ikx'} \quad \text{für } x \rightarrow \infty. \quad (3.11b)$$

Wegen der Teilchenerhaltung sind bei den Lösungen (3.4) und (3.11) die Teilchenströme auf beiden Seiten der Potentialbarriere gleich

$$1 - |r_1(-k)|^2 = \frac{k'}{k} |d_1(-k)|^2 \quad (3.12a)$$

$$1 - |r_1(k)|^2 = \frac{k}{k'} |d_1(k)|^2. \quad (3.12b)$$

Die Größen auf den rechten Seiten von (3.12a) und (3.12b) stellen die Transmissionskoeffizienten des Potentials $V_1(x)$ dar, d.h. das Verhältnis von durchgelassenen zu einfallendem Strom

$$D(k) = \frac{j d(k)}{j e(k)} = \frac{k}{k'} |d_1(k)|^2 \quad (3.13a)$$

$$D(-k) = \frac{j d(-k)}{j e(-k)} = \frac{k'}{k} |d_1(-k)|^2 \quad (3.13b)$$

Die Funktionen $\overset{1}{\psi}_{-k}(x)$ und $\overset{1*}{\psi}_{-k}(x)$ sind linear unabhängige Lösungen der Schrödingergleichung mit dem Potential $V_1(x)$ und der Energie E . Jede andere Lösung dieser Gleichung läßt sich als Linearkombination dieser beiden Funktionen darstellen. Speziell für $\overset{1}{\psi}_k(x)$ gilt also

$$\overset{1}{\psi}_k(x) = a \overset{1}{\psi}_{-k}(x) + b \overset{1*}{\psi}_{-k}(x) \quad (a, b = \text{const.}). \quad (3.14)$$

Durch Vergleich der asymptotischen Entwicklungen auf beiden Seiten von (3.14) findet man mit (3.4) und (3.11)

$$a = \frac{\tau_1(k)}{d_1(-k)} = - \frac{\tau_1^*(-k)}{d_1^*(-k)}, \quad (3.15a)$$

$$b = \frac{1}{d_1^*(-k)} = d_1(k) + \frac{|\tau_1(-k)|^2}{d_1^*(-k)}. \quad (3.15b)$$

Aus (3.12) und (3.15) folgt

$$k d_1(k) = k' d_1(-k), \quad (3.16a)$$

$$|\tau_1(k)| = |\tau_1(-k)|. \quad (3.16b)$$

Mit (3.12), (3.16) ergibt sich aus (3.10) nach einiger Umformung

$$R(k) = - \frac{\tau_1(k)}{\tau_1^*(-k)} \tau_2(k) e^{2ik'a} \frac{g^*(k)}{g(k)}, \quad (3.17a)$$

$$g = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{k d_1(k) e^{ik'a}}{k' g(k)}. \quad (3.17b)$$

mit

$$g(k) = 1 - \tau_1(k) \tau_2(k) e^{2ik'a} . \quad (3.18)$$

Setzt man

$$\tau_1(k) = |\tau_1(k)| e^{i\mu_1(k)} , \quad (3.19)$$

$$\tau_2(k) = e^{i\mu_2(k)} , \quad (3.20)$$

so wird

$$g(k) = 1 - |\tau_1(k)| e^{i\Psi(k)} \quad (3.21)$$

mit

$$\Psi(k) = \mu_1(k) + \mu_2(k) + 2k'a . \quad (3.22)$$

Die Pole der Funktion $R(k)$ sind durch die Nullstellen des Nenners in (3.17) gegeben

$$g(k) = 0. \quad (3.23)$$

Bei reellem k ist nach (3.12) $\tau_1(k) < 1$. Nach (3.21) hat $g(k)$ daher keine reellen Nullstellen. Wenn $|\tau_1(k)|$ nur wenig kleiner als eins ist, d.h. nach (3.12) und (3.13) $\mathcal{D}(k) \ll 1$, wird bei

$$\psi(k) = 2n\pi \quad (n \text{ ganz}) \quad (3.24)$$

der Betrag von $g(k)$ klein gegen eins. In der Nähe dieses Punktes kann man daher eine komplexe Nullstelle mit kleinem Imaginärteil erwarten.

Mit dem komplexen Argument

$$k = k + iq \quad (3.25)$$

ist

$$g(k) = u(k, q) + iv(k, q) \quad (3.26)$$

mit reellen Funktionen $u(k, q), v(k, q)$.

Bei hinreichend kleinem Imaginärteil q gilt für die Nullstelle

$$g(k) = u(k, 0) + u_q(k, 0)q + i(v(k, 0) + v_q(k, 0)q) = 0. \quad (3.27)$$

Damit ist

$$q = - \frac{u(k, 0)}{u_q(k, 0)} = - \frac{v(k, 0)}{v_q(k, 0)}. \quad (3.28)$$

Mit den Cauchy-Riemannschen Differentialgleichungen

$$u_k = v_q, \quad v_k = -u_q \quad (3.29)$$

wird daraus

$$q = \frac{u(k, 0)}{v_k(k, 0)} = - \frac{v(k, 0)}{u_k(k, 0)} \quad (3.30)$$

Es folgt die Konsistenzbedingung

$$u(k, 0) u_k(k, 0) + v(k, 0) v_k(k, 0) = 0$$

oder

$$\partial_k (u^2 + v^2) = \partial_k |g(k)|^2 = 0. \quad (3.31)$$

Diese Gleichung bestimmt den Realteil der Nullstellen von $g(k)$ Gleichung (3.30) den Imaginärteil. Die lineare Entwicklung (3.27) kann nur bei kleinem $|g(k)|$ gut sein. Aus den Lösungen von (3.31) muß man daher die Minima auswählen.

Nach (3.21) ist

$$|g(k)|^2 = 1 + |\tau_1(k)|^2 - 2 |\tau_1(k)| \cos \psi(k). \quad (3.32)$$

Für $|d_1(k)| \ll 1$ ist $|\tau_1(k)| \approx 1$ und die Minima von sind näherungsweise durch (3.24) gegeben.

Mit dem Wert (3.24) für $\Psi(k)$ und der Beziehung (3.12b) ergibt sich für $|g(k)|^2$ bis auf Terme höherer Ordnung in $D(k)$ der Wert

$$|g(k)|_{\min}^2 = \frac{1}{4} |D(k)|^2. \quad (3.33)$$

Die hier gemachte Näherung für die Lage des Pols wird nur dann gut sein, wenn der Wert (3.33) klein ist, d.h. für $D(k) \ll 1$. Für den Imaginärteil des Pols ergibt sich wegen $\cos \Psi = 1$ mit (3.30) und (3.21)

$$q = \frac{u(k,0)}{v(k,0)} = \frac{1 - |\tau_1(k)|^2}{-|\tau_1(k)| \Psi'(k)}, \quad \Psi'(k) = \frac{d\Psi}{dk}. \quad (3.34)$$

oder mit (3.12b), (3.13b) und Entwicklung nach $D(k)$ bis zur ersten Ordnung

$$q = - \frac{D(k)}{2 \Psi'(k)}. \quad (3.35)$$

Für die Maxima von $|g(k)|^2$ ist bei reellem k nach der Darstellung (3.21) $\Psi = \frac{\pi}{2} + 2n\pi$. Damit ist nach (3.30) und (3.21)

$$|q|_{\max} = \left| \frac{1 + |\tau_1(k)|^2}{-|\tau_1(k)|^2 \Psi'(k)} \right| \approx \frac{2}{\Psi'(k)}. \quad (3.36)$$

Dieser Wert ist wegen des fehlenden Faktors $D(k)$ groß gegen den Wert (3.35). Damit ist nochmals bestätigt, daß bei den Maxima von $|g(k)|^2$ keine Resonanz liegt.

Mit den bisherigen Ergebnissen können wir die in Kapitel II für spezielle Potentiale gewonnenen qualitativen Resultate über den Verlauf der Streulösungen bei reellem k für allgemeine Potentiale mit Resonanzen bestätigen. Mit (3.6) und (3.5) ist $|\psi_k(x_0)|$ von der Größenordnung $|\gamma|$ während $|\psi_k(x)|$ nach (3.9) für $x \gg x_0$ von der Größenordnung eins ist. Der Koeffizient γ ist also ein Maß für das Verhältnis der Amplitude der Wellenfunktion in der Potentialmulde zur Amplitude außerhalb des Potentials. Außerhalb der Resonanz ist $|g(k)|$ nach (3.21) von der Größenordnung eins. Nach (3.17b) ist $|\gamma|$ dann von der Größenordnung $\frac{k}{k'} |d_1(k)|$, d.h. klein gegen eins. In der Resonanz ist nach (3.17b), (3.33) und (3.13) $|\gamma|$ von der Größenordnung $1/|d_1(k)|^2 \gg 1$.

Dieses Ergebnis zeigt noch einmal für allgemeinere Potentiale daß bei der Streuung mit der Resonanzenergie ein nahezu gebundener Zustand entsteht.

Für die Zerfallszeit dieses Zustandes folgt aus (3.35) und (2.11b)

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\hbar k'}{m \psi'(k')} D(k) = v(k) \cdot D(k) \quad (3.37)$$

mit einer in (3.39) definierten Umlauffrequenz ν und

$$\psi'(k') = \partial_{k'} \mu_1(k) + \partial_{k'} \mu_2(k) + 2a. \quad (3.38)$$

Die Formeln (3.37-38) lassen sich für ein Potential nach Abb. 2 besonders leicht interpretieren. Den Punkt x_0 legen wir in den Bereich verschwindenden Potentials zwischen der Potentialwand bei $x = -a$ und der Potentialbarriere.

In diesem Fall ist $\mu_2(k) = \pm \pi$, $k' = k$, also

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\hbar k}{m \psi'(k)} D(k) = v(k) D(k), \quad (3.39)$$

$$\psi'(k) = \partial_k \mu_1(k) + 2a. \quad (3.40)$$

Nach (2.103) ist

$$t_d = \frac{m \partial_k \mu_1(k)}{\hbar k} \quad (3.41)$$

die Verzögerungszeit bei der Reflexion eines Wellenpakets an der Potentialbarriere gegenüber der momentanen Reflexion bei $x'=0$.

Das Wellenpaket braucht also die Zeit (u_g = Gruppengeschwindigkeit)

$$t_e = \frac{2a}{u_g} + t_d = \frac{m \psi'(k)}{\hbar k}, \quad u_g = \frac{\hbar k}{m}, \quad (3.42)$$

um den Weg von der Potentialwand zur Barriere und zurück zu durchlaufen. In (3.37) ist also die Frequenz Kehrwert einer quantenmechanisch modifizierten Laufzeit anstelle der klassischen Laufzeit in (1.1).

Für den Fall der Gültigkeit der WKB-Näherung werden wir in Kapitel IV sehen, daß die Frequenz $\nu(k)$ in der allgemeinen Formel (3.37) der Kehrwert der klassischen Umlaufzeit in der Potentialmulde ist und die Lage der Resonanzen durch eine Bohr-Sommerfeld Quantisierungsbedingung gegeben ist.

In Kapitel IV werden wir einige Beispiele zu den allgemeinen Resultaten dieses Kapitels betrachten und dabei insbesondere Abweichungen von der klassisch interpretierten Formel (1.1) diskutieren.

Wir wollen nun noch den mit den Näherungen (3.24) und (3.35) gemachten Fehler etwas genauer abschätzen. Dazu berechnen wir die Nullstellen von $q(k)$ ausgehend von der Lösung k_0 von (3.24) in der Entwicklung nach Potenzen von $D(k)$ bis zur zweiten Ordnung. Die im Anhang D durchgeführte Rechnung liefert

$$K = k_0 - \frac{iD(k_0)}{2\Psi'(k_0)} \left[1 + \frac{D(k_0)}{2} - \frac{i}{2} \cdot \frac{D'(k_0)}{\Psi'(k_0)} + \frac{iD(k_0)}{4} \cdot \frac{\Psi''(k_0)}{\Psi'^2(k_0)} \right] \quad (3.43)$$

Die Korrekturterme in der eckigen Klammer sind klein, wenn die Durchlässigkeit der Potentialbarriere $V_1(x)$ klein ist und sich mit der Energie nur langsam ändert.

Die Ergebnisse (3.32) und (3.35) sind abhängig von der Wahl des Punktes x_0 . Solange jedoch bei einer Änderung von x_0 die Korrekturterme in (3.43) klein gegen eins sind, bleibt die Abweichung der Näherungen (3.24), (3.35) von den exakten Werten klein. D.h. aber, daß die Näherungswerte (3.24), (3.35) bis auf relative Abweichungen von der Größenordnung der Korrekturterme unabhängig von der Wahl des Punktes x_0 sind.

IV. Beispiele und Näherungen

1) Exakt lösbare Beispiele

Für ein Rechteckspotential nach Abb.22

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \kappa_0^2 \Theta(x(b-x)), \quad (4.1)$$

lauten mit

$$\kappa = \sqrt{\kappa_0^2 - k^2} \quad (4.2)$$

$$\varepsilon = \frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}, \quad \eta = \frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa} \quad (4.3)$$

die Streulösungen für $0 < k < \kappa_0$
(Anhang B)

$$\bar{\psi}_k(x) = d(k) e^{ikx} \quad \text{für } x > b, \quad (4.4a)$$

$$\bar{\psi}_k(x) = d(k) e^{ikb} (\cosh \kappa(x-b) + \frac{ik}{\kappa} \sinh \kappa(x-b)) \quad (4.4b)$$

für $0 < x < b$,

$$\bar{\psi}_k(x) = e^{ikx} + r(k) e^{-ikx} \quad \text{für } x < 0 \quad (4.4c)$$

mit

$$d(k) = \frac{e^{-ikb}}{\cosh \kappa b + \frac{i\varepsilon}{2} \sinh \kappa b}, \quad (4.5a)$$

$$r(k) = -\frac{i\gamma}{2} \sinh \kappa b \, d(k). \quad (4.5b)$$

Die Phase von $r(k)$ ist

$$\mu(k) = \arctan \frac{2 \coth \kappa b}{\varepsilon} \quad (4.6a)$$

mit $\sin \mu \leq 0$ und $\varepsilon \cos \mu \leq 0$. (4.6b)

Für die Ableitung der Phase $\mu(k)$ findet man

$$\mu'(k) = \frac{|d(k)|^2}{2\kappa} \{ \kappa b \cdot \varepsilon + \gamma^2 \sinh \kappa b \cosh \kappa b \}. \quad (4.7)$$

Für das um eine unendlich hohe Potentialwand bei $x=-a$ ergänzte Rechteckspotential gibt es Resonanzen nur für $D \ll 1$. Im folgenden werden wir unter dieser Bedingung die Resonanzstreulösungen und die Zerfallszeiten diskutieren. Nach (4.5a) gilt mit $\varepsilon^2 = \gamma^2 + 4$

$$D(k) = |d(k)|^2 = \frac{1}{1 + \frac{\gamma^2}{4} \sinh^2 \kappa b}. \quad (4.8)$$

Die Bedingung $D \ll 1$ ist erfüllt, falls mit einer Konstanten $L \gg 1$ gilt

$$\frac{\gamma}{2} \sinh \kappa b = L \gg 1. \quad (4.9)$$

Mit den dimensionslosen Variablen

$$b' = k b \quad (4.10)$$

und
$$x_0' = \frac{x_0}{k} \quad (4.11)$$

folgt aus (4.9)

$$b' = \frac{1}{\sqrt{x_0'^2 - 1}} \operatorname{Arsinh} \frac{2L \sqrt{x_0'^2 - 1}}{x_0'^2} \quad (4.12)$$

Für $\sqrt{x_0'^2 - 1} \ll \frac{1}{L}$ folgt aus der Entwicklung der Arsinh-Funktion

$$b' = 2L - 2 \left(L + \frac{2}{3} L^3 \right) (x_0'^2 - 1) \quad (4.13)$$

Für $\sqrt{x_0'^2 - 1} \gg L$ gilt analog

$$b' = \frac{2L}{x_0'^2 - 1} - 2 \left(L + \frac{2}{3} L^3 \right) \frac{1}{(x_0'^2 - 1)^2} \quad (4.14)$$

Abb. 23 zeigt den Verlauf der Kurve (4.12) für $L=10$ im $x_0'-b'$ -Achsenkreuz. Oberhalb der Kurve ist $D < 10^{-2}$.

Wegen $\operatorname{Arsinh} L \gg \operatorname{Arsinh} \frac{2L \sqrt{x_0'^2 - 1}}{x_0'^2}$

verläuft die Kurve

$$b' = \frac{\operatorname{Arsinh} L}{\sqrt{x_0'^2 - 1}} \quad (4.15)$$

außer am Berührungspunkt $x_0' = \sqrt{2}$ ganz oberhalb der Kurve (4.12), verschärft also die Bedingung $D < 10^{-2}$ (Abb.23).

Es gibt einen kleinen Bereich mit $k^2 > \kappa_0^2$ und $D \ll 1$. Für $k^2 > \kappa_0^2$ ist

$$D = \frac{1}{1 + \frac{\bar{\varepsilon}^2}{4} \sinh^2 \bar{x} b} \quad (4.16)$$

mit $\bar{x} = \sqrt{k^2 - \kappa_0^2}$, $\bar{\varepsilon} = \frac{\bar{x}}{k} - \frac{k}{\bar{x}}$ (4.17)

$D \ll 1$ bedeutet hier

$$\frac{|\bar{\varepsilon}|}{2} |\sinh \bar{x} b| = L \gg 1 \quad (4.18)$$

oder in dimensionslosen Variablen

$$|\sinh \sqrt{1 - \kappa_0'^2} b'| = \frac{2L \sqrt{1 - \kappa_0'^2}}{\kappa_0'^2} \quad (4.19)$$

Diese Gleichung kann nur erfüllt sein für

$$\frac{2L \sqrt{1 - \kappa_0'^2}}{\kappa_0'^2} \leq 1$$

d.h. bis auf Terme der Größenordnung L^{-3}

$$1 - \frac{1}{8L^2} \leq \kappa_0' \leq 1, \quad (4.20)$$

Aus (4.19) folgt für diesen Bereich

$$b' = \frac{1}{\sqrt{1 - \kappa_0'^2}} \left| \arcsin \frac{2L \sqrt{1 - \kappa_0'^2}}{\kappa_0'^2} \right|. \quad (4.21)$$

Die Resonanzen liegen nach (3.24) und (3.22) mit $\mu_2(k) = \pi$ bei

$$\mu(k) + 2ka = (2n-1)\pi. \quad (4.22)$$

Wegen (4.6b) liegt μ in einem der Intervalle

$$(2n-1)\pi \leq \mu \leq 2n\pi \quad (n \text{ ganz}). \quad (4.23)$$

Damit gilt nach (4.6a)

$$\tan ka = - \frac{2 \coth \alpha b}{\varepsilon} \quad (4.24a)$$

mit $(n - \frac{1}{2})\pi \leq ka \leq n\pi. \quad (4.24b)$

Die Zerfallszeit ist mit Ψ' nach (3.40) und (4.7)

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\hbar k}{m \Psi'} |d(k)|^2. \quad (4.25)$$

Nach (3.5), (3.17) und (3.21) lautet die Steuflösung $\Psi_k(x)$ zum Gesamtpotential ($\tau_2(k) = -1$)

$$\Psi_k(x) = 2\gamma \sin k(x+a) \quad \text{für } -a < x < 0 \quad (4.26a)$$

mit

$$2\gamma(k) = d^*(k) \frac{e^{ika}}{1 - |\tau(k)| e^{i\Psi(k)}}, \quad (4.27)$$

$$\psi_k(x) = 2\gamma \left(\sin ka \cosh \kappa x + \frac{k}{\kappa} \cos ka \sinh \kappa x \right) \quad (4.26b)$$

für $0 < x < b$.

Oberhalb der Kurve (4.15) ist $\kappa b \gg 1$ und damit nach (4.5)

$$d(k) = \frac{2e^{-ikb}e^{-\kappa b}}{1 + \frac{i\epsilon}{2}} \quad (4.28a)$$

$$r(k) = -\frac{i\gamma}{2} \cdot \frac{1}{1 + \frac{i\epsilon}{2}}. \quad (4.28b)$$

Aus (4.24a) wird wegen $\coth \kappa b \approx 1$

$$\frac{2 \tan ka}{1 - \tan^2 ka} = \frac{-\frac{2k}{\kappa}}{1 - \frac{k^2}{\kappa^2}} = \frac{\frac{2\kappa}{k}}{1 - \frac{\kappa^2}{k^2}}.$$

Daraus folgt

$$\tan ka = -\frac{k}{\kappa} \quad (4.29a)$$

oder $\tan ka = \frac{\kappa}{k} \quad (4.29b)$

Nur die Lösungen von (4.29a) erfüllen die Bedingung (4.24b) (Abb.24).
Die Zerfallszeit ist nach (4.25) und (4.7)

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\hbar k}{2m(a + \frac{1}{\kappa})} \cdot \frac{16k^2 \kappa^2 e^{-2\kappa b}}{\kappa_0^4}. \quad (4.30)$$

Der Term $1/\kappa$ im Nenner ist die Korrektur zur klassischen Laufzeit.

Für $\kappa \gg k$ (Bereich II in Abb. 23) liegen die Lösungen von Gleichung (29a) in der Nähe von $ka = \pi + n\pi$, für $k \gg \kappa$ (Bereich III in Abb. 23) in der Nähe von $ka = \frac{\pi}{2} + n\pi$. Die entsprechenden Resonanzstreu-
funktionen nach (4.26) und (4.27) sind in Abb. 26 b und c skizziert. Innerhalb des Rechteckpotentials fallen die Funktionen im wesentlichen exponentiell ab. Für $k \gg \kappa$ ist dieser Abfall langsam gegenüber der Wellenlänge $2\pi/k$. Damit die Bedingung $\kappa b \gg 1$ erfüllt ist, muß dann das Potential breit gegen die Wellenlänge sein. In diesem Fall wird der Term $1/\kappa$ in (4.30) groß. Für $\sqrt{\kappa_0^2 - 1} \ll L$ (Bereich I in Abb. 23) gilt mit

$$\alpha = \kappa_0^2 b \quad (4.31)$$

auf der Grenzkurve (4.12) in der Entwicklung (4.14)

$$\frac{\kappa}{k} = 2L \gg 1 \quad (4.32)$$

Für großes κ_0 wird bei festem α die Potentialschwelle sehr schmal und hoch und geht für $\kappa_0 \rightarrow \infty$ in das δ -Potential

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha \delta(x) \quad (4.33)$$

über. Für großes κ_0 ist

$$\kappa b \approx \kappa_0 b = \frac{\alpha}{\kappa_0} \ll 1. \quad (4.34)$$

Mit $\sinh \kappa b \approx \kappa b$ und $\cosh \kappa b \approx 1$ wird dann

$$a(k) = \frac{1}{1 + \frac{i\alpha}{2k}} \quad (4.35)$$

$$r(k) = - \frac{\frac{i\alpha}{2k}}{1 + \frac{i\alpha}{2k}} \quad (4.36)$$

Gleichung (4.24a) geht über in (Abb. 25)

$$\tan 2ka = - \frac{2k}{\alpha} \quad (4.37)$$

Die Lösungen von (4.37) bis zur Ordnung α^{-2} stimmen mit $\text{Re } k_p$ nach (2.75) überein, wie es wegen der Äquivalenz der antisymmetrischen Lösungen zum Potential (2.57) mit den hier behandelten Zuständen sein muß.

Für δ -ähnliches Potential mit endlichem κ_0 gilt im Zentrum der Resonanz mit (4.26a) (Abb. 26a)

$$\psi_k(x) = 2\gamma \left[\frac{k}{\alpha} \left(1 + \frac{\kappa^2 x^2}{2} \right) - kx \right] \quad \text{für } 0 < x < b. \quad (4.38)$$

Die Funktion ändert sich in diesem Bereich nur schwach, die Ableitung aber stark. Die Zerfallszeit ergibt mit (4.7) und (4.25) das Ergebnis (2.117). Korrekturen zur klassischen Formel (1.1) sind von der Ordnung α^{-3} und damit vernachlässigbar.

Für

$$\sqrt{\kappa_0^2 - 1} = \frac{\kappa}{k} \ll \frac{1}{L} \quad (2.39)$$

(Bereich IV in Abb. 23)

wird auf der Grenzkurve (4.12) in der Entwicklung (4.13)

$$kb = 2L \gg 1 \quad (4.40)$$

d.h. das Potential ist breit gegen die Wellenlänge $\frac{2\pi}{k}$. Aus (2.39) und (2.40) folgt

$$xb \ll 1, \quad (4.41)$$

d.h. die Energie des Teilchens ist etwa gleich der Höhe des Potentials.

Damit gilt nach (4.5)

$$d(k) = \frac{e^{-ikb}}{1 - \frac{ikb}{2}}, \quad (4.42a)$$

$$r(k) = - \frac{ikb}{2} \cdot \frac{1}{1 - \frac{ikb}{2}}. \quad (4.42b)$$

Aus (4.24a) wird (Abb. 25)

$$\tan 2ka = \frac{2}{kb} \quad (4.43)$$

Unter Berücksichtigung der Bedingung (4.26b) findet man Lösungen dicht oberhalb von $k_0 = (n - \frac{1}{2}) \frac{\pi}{a}$, in Entwicklung nach $1/k_0 b$

$$k = k_0 \left(1 + \frac{1}{k_0 b} \right) \quad (4.44)$$

Mit (4.26b) findet man für den Verlauf von $\psi_k(x)$ im Zentrum der tiefsten Resonanz (Abb. 26d)

$$\psi_k(x) \approx 2\psi(1 - \frac{x}{b}) \quad \text{für } 0 < x < b. \quad (4.45)$$

Die Zerfallszeit ist

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\hbar}{m(a + \frac{1}{3}b)} \cdot \frac{1}{kb^2} \quad (4.46)$$

Der Korrekturterm $b/3$ im Nenner überwiegt den klassischen Term a , da a nur von der Größenordnung der Wellenlänge ist. In diesem Grenzfall ist also die quantenmechanische Verzögerungszeit größer als die klassische Laufzeit.

Als weiteres exakt lösbares Beispiel betrachten wir das Dreieckspotential nach Abb. 27

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} v_0 \left(1 - \frac{x}{b}\right) \Theta[x(b-x)] \quad (4.47)$$

Mit den Airy-Funktionen A_i, B_i (Abramowitz, Stegun /6 /) und den Abkürzungen

$$\xi_b = -\left(\frac{b}{v_0}\right)^{2/3} k^2 \quad (4.48a)$$

$$\xi_0 = \left(\frac{b}{v_0}\right)^{2/3} (v_0 - k^2) \quad (4.48b)$$

$$L_1 = i\sqrt{-\xi_b} B_i(\xi_b) + B_i'(\xi_b) \quad (4.48c)$$

$$L_2 = -i\sqrt{-\xi_b} A_i(\xi_b) - A_i'(\xi_b) \quad (4.48d)$$

$$\bar{\varphi}(\xi, \xi_b) = L_1(\xi_b) A_i(\xi) + L_2(\xi_b) B_i(\xi) \quad (4.48e)$$

$$\varphi'(\xi, \xi_b) = \partial_\xi \varphi(\xi, \xi_b)$$

gilt für dieses Potential mit $0 < k < \sqrt{v_0}$ (Anhang C) bei von links einfallender Welle

$$r(k) = \frac{\sqrt{-\xi_b} \bar{\varphi}(\xi_0, \xi_b) - i \bar{\varphi}'(\xi_0, \xi_b)}{\sqrt{-\xi_b} \bar{\varphi}(\xi_0, \xi_b) + i \bar{\varphi}'(\xi_0, \xi_b)} \quad (4.49a)$$

$$d(k) = \frac{2}{\pi} \cdot \frac{e^{-i k b}}{\bar{\varphi}(\xi_0, \xi_b) + \frac{1}{\sqrt{-\xi_b}} \bar{\varphi}'(\xi_0, \xi_b)} \quad (4.49b)$$

Abb. 34 zeigt numerisch berechnete Grenzkurven für $|d(k)| \leq C$ ($C = 0,5 \dots 10^{-5}$) in den dimensionslosen Variablen

$$\bar{v}_0 = \frac{v_0}{k^2} \quad (4.50a)$$

$$\bar{b} = k b \quad (4.50b)$$

Die Resonanzen für das Dreieckspotential mit Potentialwand bei $x = -a$ sind im allgemeinen Fall schwer zu diskutieren. Für Spezialfälle werden wir sie im nächsten Abschnitt im Zusammenhang mit der WKB-Näherung betrachten.

2) WKB-Methode

Mit

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} v(x) \quad (4.51)$$

$$k^2(x) = k^2 - v(x) \quad (4.52)$$

lautet die eindimensionale stationäre Schrödingergleichung

$$\psi''(x) + k^2(x) \psi(x) = 0. \quad (4.53)$$

Mit dem Ansatz

$$\psi(x) = A(x) e^{iS(x)} \quad (4.54)$$

wird aus (4.54)

$$A'' - S'^2 A + i(2S'A' + S''A) + k^2(x)A = 0 \quad (4.55)$$

Im klassisch erlaubten Bereich $k^2(x) > 0$ oszilliert die Funktion $\psi(x)$. Man kann dann (4.54) als Darstellung von $\psi(x)$ durch Betrag $A(x)$ und Phase $S(x)$ auffassen. Damit folgt aus (4.55) durch Zerlegung in Real- und Imaginärteil

$$S'^2 - k^2(x) = \frac{A''}{A} \quad (4.56a)$$

$$2S'A' + S''A = \partial_x (A^2 S') = 0 \quad (4.56b)$$

Im klassisch verbotenen Bereich $k^2(x) < 0$ kann man die Zerlegung (4.56) als willkürliche Zusatzbedingung für die zwei unabhängigen Funktionen $A(x), S(x)$ auffassen, durch die in (4.54) eine Funktion $\psi(x)$ dargestellt ist.

Aus (4.56b) folgt durch Integration mit einer Konstanten C

$$A = \frac{C}{\sqrt{S'}} \quad (4.57)$$

Für $\frac{A''}{A} \ll k^2(x) \quad (4.58)$

geht (4.56a) in die klassische Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$S'^2 = k^2(x) \quad (4.59)$$

über. In dieser Näherung gilt für den klassisch erlaubten Bereich $k^2(x) > 0$

$$S(x) = \pm \int^x k(x) dx \quad (4.60a)$$

und für den klassisch verbotenen Bereich $k^2(x) < 0$

$$S(x) = \pm i \int^x \kappa(x) dx \quad (4.60b)$$

$$\mathcal{H}(x) = \sqrt{-k^2(x)} \quad (4.61)$$

Damit und mit (4.57) lautet die Näherungslösung der Schrödinger-
gleichung mit Konstanten $C_1, \dots, C_4$

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{k(x)}} \exp\left(i \int^x k(x) dx\right) + \frac{C_2}{\sqrt{k(x)}} \exp\left(-i \int^x k(x) dx\right) \quad (4.62a)$$

für $k^2(x) > 0$,

$$\psi(x) = \frac{C_3}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left(\int^x \kappa(x) dx\right) + \frac{C_4}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left(-\int^x \kappa(x) dx\right) \quad (4.62b)$$

für $k^2(x) < 0$.

Setzt man (4.57) in die Bedingung (4.58) ein, so findet man als
Gültigkeitskriterien für die Näherung (4.62)

$$\left| \frac{k'(x)}{k^2(x)} \right| \ll 1 \quad \text{und} \quad \left| \frac{k''(x)}{k^3(x)} \right| \ll 1. \quad (4.63)$$

Im allgemeinen genügt es, die erste Bedingung (4.63) zu fordern.
Denn wenn in einem endlichen Bereich die Steigung $k'(x)$ klein
bleibt, kann die Krümmung nicht groß sein, außer wenn starke
Rechts- und Linkskrümmungen abwechselnd sehr schnell aufeinander-

folgen (Abb. 28). Wenn wir also den zuletzt genannten Fall ausschließen, brauchen wir im klassisch erlaubten Bereich nur

$$\left| \frac{k'(x)}{k^2(x)} \right| \ll 1 \quad (4.64a)$$

und analog im klassisch verbotenen Bereich

$$\left| \frac{\hbar'(x)}{\hbar^2(x)} \right| \ll 1 \quad (4.64b)$$

zu fordern.

Die Bedingungen (4.64) bedeuten anschaulich: Die lokale Wellenlänge $2\pi/k(x)$ ändert sich nur wenig über eine Wellenlänge. Dann ändert sich nach (4.52) auch das Potential über eine Wellenlänge nur wenig. Das bedeutet aber, daß die klassische Mechanik näherungsweise gilt. Die Ergebnisse (4.62) mit der nach (4.59) klassisch berechneten Phase $S(x)$ nennen wir daher quasiklassische Näherungen.

In Bereichen um die Punkte x_0 mit $k(x_0) = 0$, also um die Umkehrpunkte der klassischen Bewegung, sind die Bedingungen (4.64) wegen des kleinen Nenners nicht erfüllt. Dort werden also die Näherungen (4.62) falsch. Im Umkehrpunkt selbst werden diese Ausdrücke sogar singulär.

Das Hauptproblem bei der Anwendung der quasiklassischen Näherung besteht in der Überbrückung der oben genannten Bereiche. Dabei ist weniger die genaue Gestalt der Lösung in diesen Bereichen interessant, als vielmehr die Verknüpfung der quasiklassischen Näherungen zu beiden Seiten eines Umkehrpunktes. Allgemein kann man dieses Problem folgendermaßen lösen.

In einem Bereich um den Umkehrpunkt, der zu beiden Seiten mit dem Gültigkeitsbereich der quasiklassischen Näherung überlappt, löst man die Schrödingergleichung mit anderen Methoden und identifiziert

dieser Lösung in den Überlappungsbereichen mit den quasiklassischen Näherungen.

Wir lösen dieses Problem für den einfachsten Fall, daß sich das Potential linear um den Umkehrpunkt entwickeln läßt und daß diese Entwicklung bis in den Gültigkeitsbereich der quasiklassischen Näherung gut ist.

Wir betrachten ein Potential nach Abb. 29, wobei der Einfachheit halber der Ursprung des Koordinatensystems in den Umkehrpunkt gelegt ist. Die Integrale (4.60) beziehen wir auf den Umkehrpunkt und setzen

$$\eta(x) = \int_x^0 k(x) dx \quad \text{für } x < 0, \quad (4.66a)$$

$$\xi(x) = \int_0^x \kappa(x) dx \quad \text{für } x > 0. \quad (4.66b)$$

Damit kann man die quasiklassischen Näherungen in folgender Form schreiben

$$\psi = \frac{C}{\sqrt{k(x)}} e^{\pm i\eta(x)} \quad \text{für } x < 0 \quad (4.67a)$$

$$\psi = \frac{C}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{\pm \xi(x)} \quad \text{für } x > 0. \quad (4.67b)$$

In der Nähe des Umkehrpunktes gilt die lineare Entwicklung

$$k^2(x) = -\kappa^2(x) = v_0' x, \quad v_0' = v'(0) \quad (4.68)$$

Damit wird aus (4.66)

$$\eta(x) = \sqrt{v_0'} \frac{2}{3} (-x)^{3/2} \quad \text{für } x < 0 \quad (4.69a)$$

$$\xi(x) = \sqrt{v_0'} \frac{2}{3} x^{3/2} \quad \text{für } x > 0 \quad (4.69b)$$

Im Gültigkeitsbereich der linearen Entwicklung von $\psi(x)$ lautet die Schrödingergleichung

$$\psi''(x) - v_0' x \psi(x) = 0 \quad (4.70)$$

Linear unabhängige Lösungen dieser Gleichung sind die Airy-Funktionen $A_i(\sqrt[3]{v_0'} x)$ und $B_i(\sqrt[3]{v_0'} x)$ (Abramowitz, Stegun /6/). Nach den obigen Annahmen muß die lineare Entwicklung (4.68) bis in den Gültigkeitsbereich von (4.64) gut sein, d.h. für

$$|\sqrt{v_0'} x^{3/2}| \gg 1. \quad (4.71)$$

Für diesen Fall gelten die asymptotischen Entwicklungen der Airy-Funktionen /6/.

Diese können mit (4.67) - (4.69) in folgender Form geschrieben werden

$$\begin{aligned} \pi^{1/2} v_0'^{1/6} \operatorname{Ai}(\sqrt[3]{v_0'} x) &\propto \frac{1}{2(v_0' x)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3} \sqrt[3]{v_0'} x^{3/2}} \\ &= \frac{1}{2 \sqrt{k(x)}} e^{-\xi(x)} \quad \text{für } x > 0, \end{aligned} \quad (4.72a)$$

$$\begin{aligned} \pi^{1/2} v_0'^{1/6} \operatorname{Ai}(\sqrt[3]{v_0'} x) &\propto \frac{1}{(-v_0' x)^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3} \sqrt[3]{v_0'} (-x)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\eta(x) + \frac{\pi}{4}\right) \quad \text{für } x < 0, \end{aligned} \quad (4.72b)$$

$$\begin{aligned} \pi^{1/2} v_0'^{1/6} \operatorname{Bi}(\sqrt[3]{v_0'} x) &\propto \frac{1}{(v_0' x)^{1/4}} e^{\frac{2}{3} \sqrt[3]{v_0'} x^{3/2}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{k(x)}} e^{\xi(x)} \quad \text{für } x > 0, \end{aligned} \quad (4.73a)$$

$$\begin{aligned} \pi^{1/2} v_0'^{1/6} \operatorname{Bi}(\sqrt[3]{v_0'} x) &\propto \frac{1}{(-v_0' x)^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3} \sqrt[3]{v_0'} (-x)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\frac{2}{3} \sqrt[3]{v_0'} (-x)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \\ &\quad \text{für } x < 0. \end{aligned} \quad (4.73b)$$

Damit hat man folgende Zuordnung von quasiklassischen Näherungen, wobei nach (4.71) und (4.69) $\xi(x)$ und $\gamma(x)$ groß gegen eins sind.

$x < 0$	$x > 0$	
$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\gamma(x) + \frac{\pi}{4}\right)$	$\psi_1 = \frac{1}{2\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\xi(x)}$	(4.74a)
$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\gamma(x) + \frac{\pi}{4}\right)$	$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{\xi(x)}$	(4.74b)

Spiegelt man das Potential am Umkehrpunkt, so findet man Zuordnungen von analoger Form, wobei nur klassisch erlaubter und klassisch verbotener Bereich und die Integrationsgrenzen in (4.66) vertauscht sind.

Die Anwendung der quasiklassischen Näherung mit den Zuordnungen (4.74) zur Überbrückung eines Umkehrpunktes nennt man WKB-Methode. Die Kriterien für die Gültigkeit des Verfahrens wollen wir an zwei Beispielen diskutieren. Für ein analytisches Potential mit $v''(0) \neq 0$ ist die lineare Näherung gut, wenn gilt

$$|v''(0)| |x|^2 \ll |v'(0)| |x| \quad (4.75)$$

Mit (4.71) folgt

$$\frac{1}{|v'(0)|^{1/3}} \ll |x| \ll \left| \frac{v'(0)}{v''(0)} \right| \quad (4.76)$$

und damit die notwendige Bedingung

$$\frac{|v''(0)|}{|v(0)|^{4/3}} \ll 1. \quad (4.77)$$

Für das Potential

$$v(x) = v_0 e^{-\frac{|x|}{b}} \quad (4.78)$$

mit den Umkehrpunkten x_0 nach

$$k^2 - v_0 e^{-\frac{|x_0|}{b}} = 0$$

folgt daraus

$$kb \gg 1. \quad (4.79)$$

Die Ausdehnung b des Potentials muß also groß gegen die Wellenlänge sein. Die Bedingung (4.64) bei $x=0$ liefert

$$\frac{v_0}{b(k^2 - v_0)^{3/2}} \ll 1 \quad (4.80)$$

Diese Bedingung läßt sich nur erfüllen, wenn $k^2 < v_0$ ist.

Bei einem Potential nach Abb. 30, bei dem der lineare Bereich um den Umkehrpunkt in einem Knick in den quasiklassischen Bereich übergeht, kann man die WKB-Methode nicht immer anwenden, denn wenn der steile lineare Bereich nicht sehr hoch ist, wird an seinen Enden die Bedingung (4.71) nicht erfüllt sein, man

wird also die Airy-Funktionen nicht asymptotisch entwickeln können. In diesen Fällen kann man aber an den Knickpunkten die quasiklassischen Lösungen stetig und differenzierbar an die Airy-Funktionen anschließen. Im Extremfall des senkrechten Potentialsprungs kann man die quasiklassischen Lösungen zu beiden Seiten direkt stetig und differenzierbar aneinander anschließen.

Die WKB-Lösung für das Potential nach Abb. 29 mit Umkehrpunkt bei $x=0$ muß für $x>0$ exponentiell abfallen. Nach (4.74a) hat sie dann für $x<0$ die Gestalt

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\gamma(x) + \frac{\pi}{4}\right) \quad (4.81a)$$

$$\propto \frac{1}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_{-\infty}^0 (k(x) - k) dx - kx + \frac{\pi}{4}\right) \quad (4.81b)$$

für $x \rightarrow -\infty$

Daraus findet man als Phase von $r(k)$ ($|r(k)|=1$)

$$\mu(k) = 2 \int_{-\infty}^0 (k(x) - k) dx - \frac{\pi}{2} \quad (4.82)$$

Nach (2.101) gilt für die Verzögerungszeit t_d bei der Reflexion an einem Potential gegenüber der freien Bewegung mit momentaner Reflexion bei $x=0$

$$t_d = \frac{m}{\hbar k} \mu'(k) \quad (4.83)$$

Mit (4.82) wird daraus

$$t_d = 2 \int_{-\infty}^0 dx \left(\frac{m}{\hbar \sqrt{k^2 - v(x)}} - \frac{m}{\hbar k} \right) \quad (4.84)$$

Der Integrand in (4.84) verschwindet außerhalb des Potentials. Innerhalb des Potentials ist er gleich der Differenz der Kehrwerte der klassischen Geschwindigkeiten mit und ohne Potential. Die Verzögerungszeit ist nach (4.84) also gleich der Differenz der klassischen Laufzeit vom Rand des Potentials zum Umkehrpunkt und zurück zur entsprechenden Laufzeit bei freier Bewegung. Die WKB-Methode liefert also dieselben Laufzeiten wie die klassische Mechanik.

Wir wenden die WKB-Methode nun auf die Streuung an einer Potentialbarriere nach Abb. 31 an. Bei von links einfallender Welle muß die Lösung rechts vom Umkehrpunkt x_3 eine auslaufende Welle sein.

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \exp \left(i \int_{x_3}^x k(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) \quad \text{für } x > x_3. \quad (4.85a)$$

Nach (4.74) ist die Lösung im klassisch verbotenen Bereich eine Linearkombination von exponentiell ansteigenden und abfallenden Anteilen. Da $\xi(x)$ in (4.74) immer groß gegen eins ist, kann man den nach links exponentiell abfallenden Anteil vernachlässigen.⁺ Nach (4.74b), (4.66) und dem im Anschluß an (4.74) Gesagten gilt also

$$\begin{aligned} \psi_k(x) &= \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left(\int_x^{x_3} \kappa(x') dx' \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left(\int_{x_2}^{x_3} \kappa(x') dx' \right) \exp \left(- \int_{x_2}^x \kappa(x') dx' \right) \quad (4.85b) \\ &\quad \text{für } x_2 < x < x_3. \end{aligned}$$

⁺) Der Fehler im exponentiell ansteigenden Anteil ist wegen der Ungenauigkeit der asymptotischen Entwicklungen (4.72), (4.73), deren zweiter Term nur um einen Faktor ξ^{-1} kleiner ist als der erste (Abramowitz-Stegun /6/), größer als der gesamte exponentiell abfallende Anteil.

Nach (4.74a) lautet dann die Streulösung links von x_2

$$\psi_k(x) = \frac{2}{\sqrt{k(x)}} \cdot \exp\left(\int_{x_2}^{x_3} \kappa(x') dx'\right) \sin\left(\int_x^{x_2} k(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \quad (4.85c)$$

Für $x \rightarrow +\infty$ geht $k(x)$ in k , für $x \rightarrow -\infty$ in $k' = \sqrt{\frac{2mE_0}{\hbar^2}}$ (s. Abb. 31) über. Daraus ergibt sich das Betragsquadrat des Koeffizienten $d(k)$ als Verhältnis des Amplitudenquadrats der einfallenden zum Amplitudenquadrat der durchgelassenen Welle

$$|d(k)|^2 = \frac{k'}{k} \exp\left(-2 \int_{x_2}^{x_3} \kappa(x) dx\right) \quad (4.86a)$$

Der Transmissionskoeffizient (3.13a) wird damit

$$D(k) = \frac{k}{k'} |d(k)|^2 = \exp\left(-2 \int_{x_2}^{x_3} \kappa(x) dx\right). \quad (4.86b)$$

Für die auf x_2 bezogene Phase von $\tau(k)$ finden wir analog zu (4.82)

$$\mu(k) = 2 \cdot \int_{-\infty}^{x_2} (k(x) - k') dx - \frac{\pi}{2} \quad (4.87)$$

Der Betrag von $\tau(k)$ ist in unserer Näherung gleich eins, obwohl der Transmissionskoeffizient nicht verschwindet. Die Näherung erfüllt also die Stromerhaltung nur bis auf Terme von der Größenordnung der Durchlässigkeit.

Wir wenden die Ergebnisse (4.85) und (4.87) auf ein Potential nach Abb. 32 an. Für die in (3.19-20) definierten Phasen ergibt sich (bezogen auf die Umkehrpunkte x_1, x_2)

$$\mu_1(k) = 2 \cdot \int_{x_0}^{x_2} (k(x) - k') dx - \frac{\pi}{2} \quad (4.88a)$$

$$\mu_2(k) = 2 \cdot \int_{x_1}^{x_0} (k(x) - k') dx - \frac{\pi}{2}. \quad (4.88b)$$

Daraus folgt mit $a = x_2 - x_1$

$$\begin{aligned}\Psi(k) &= \mu_1(k) + \mu_2(k) + 2k'a \\ &= 2 \int_{x_1}^{x_2} k(x) dx - \pi\end{aligned}\quad (4.89)$$

Die Bedingung (3.24) für die Lage der Resonanz läßt sich in dieser Näherung mit dem Impuls $p(x) = \hbar k(x)$ als Bohr-Sommerfeld-Quantisierungs-Bedingung schreiben

$$\oint p(x) dx = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar. \quad (4.90)$$

Für die Zerfallszeit finden wir nach (3.37-38) und (4.89)

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{2 \cdot \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{\frac{\hbar k(x)}{m}}} D(k) = v(k) D(k) \quad (4.91)$$

mit $D(k)$ nach (4.86).

Der Frequenzfaktor in (4.91) ist der Kehrwert der klassischen Umlaufzeit in der Potentialmulde. Die WKB-Näherung liefert also wieder die klassisch interpretierte Formel (1.1). Die Ergebnisse sind insbesondere unabhängig von der Wahl des Punktes x_0 , an dem das Potential zerteilt wird.

Für ein Potential nach Abb. 2 mit einer unendlich hohen Potentialwand bei $x = -a$ findet man mit $\mu_2(k) = \pi$

$$\begin{aligned}\Psi(k) &= -\pi + \mu_1(k) + 2k(a + x_2) \\ &= 2 \cdot \int_{-a}^{x_2} k(x) dx - \frac{3\pi}{2}\end{aligned}\quad (4.92)$$

Daraus folgt die modifizierte Bohr-Sommerfeld-Bedingung für die Lage der Resonanzen

$$\oint p(x) dx = \left(n + \frac{3}{4}\right) h. \quad (4.93)$$

Für Potentiale nach Abb. 33 mit bei $x=0$ senkrecht ansteigender Vorderkante können die Bedingungen für die Gültigkeit der quasiklassischen Näherung bis unmittelbar rechts von der Kante erfüllt sein. Am Umkehrpunkt x_1 wendet man die Anschlußformel wie beim Potential Abb. 31 an. Bei $x=0$ schließt man einfallende und reflektierte Welle stetig und differenzierbar an. So findet man

$$r(k) = - \frac{\psi(0+) + ik}{\psi(0+) - ik} \quad (4.94a)$$

$$|d(k)|^2 = \frac{4k \psi(0+)}{k^2 + \psi^2(0+)} \exp\left(-\int_{x_0}^{x_1} \psi(x) dx\right) \quad (4.94b)$$

Dabei wurden Terme $\frac{\psi'(0+)}{\psi^2(0+)}$ gegen eins vernachlässigt.

Für das Dreieckspotential nach Abb. 27 findet man nach (4.94b)

$$|d(k)|^2 = \frac{4k(v_0 - k^2)^{1/2}}{v_0} \exp\left(-\frac{4}{3} \cdot \frac{b}{v_0} \cdot (v_0 - k^2)^{3/2}\right) \quad (4.95)$$

Damit die Ergebnisse (4.94), (4.95) gute Näherungen darstellen, müssen die Bedingungen (4.64) mindestens da erfüllt sein, wo das Potential vom linearen Verlauf abweicht. Da dies hier nur bei $x=0$ und $x=b$ der Fall ist, lauten die Bedingungen für die Gültigkeit der Näherung (4.94)

$$\left| \frac{k'(b)}{k^2(b)} \right| = \frac{v_0}{2b k^3} \ll 1 \quad (4.96a)$$

$$\left| \frac{x'(0+)}{x^2(0+)} \right| = \frac{v_0}{2b (v_0 - k^2)^{3/2}} \ll 1 \quad (4.96b)$$

oder mit den Bezeichnungen (4.48)

$$\frac{\bar{b}}{\bar{v}_0} = (-\xi_b)^{3/2} \gg 1, \quad (4.96c)$$

$$\frac{\bar{b}(\bar{v}_0 - 1)^{3/2}}{\bar{v}_0} = \xi_0^{3/2} \gg 1. \quad (4.96d)$$

Das Potential muß also breit und flach sein. Wegen des Faktors $\bar{v}_0 - 1$ in (4.96b) darf die Energie des Teilchens nicht zu dicht unterhalb des Maximums des Potentials liegen

$$\bar{v}_0 > 1 \quad (4.96e)$$

Die Ergebnisse der WKB-Näherung kann man auch durch Entwicklung der exakten Resultate für große ξ_0 und $|\xi_b|$ mit Hilfe der asymptotischen Entwicklungen für die Airy-Funktionen gewinnen.

In Abb. 35 sind numerisch berechnete Linien gleichen relativen Fehlers der Näherung (4.90) für den Betrag von $d(k)$ dargestellt

(Gestrichelt sind die Grenzkurven aus Abb. 34 eingezeichnet). Die Bedingungen (4.96) liefen einen Winkelbereich nach Abb. 35a in dem die Näherung (4.95) gut sein soll. Qualitativ findet man diesen Bereich auch in Abb. 35 wieder. Besonders groß wird der Fehler für großes $\bar{v}_0$ und kleines $\bar{b}$, also bei hohem, schmalen Potential.

Abb. 36 zeigt die entsprechenden Kurven für den Fehler der Phase. Der Bereich geringen Phasenfehlers der WKB-Näherung scheint demnach mit dem Bereich kleiner Durchlässigkeit ungefähr übereinzustimmen.

In WKB-Näherung ist die Phase des Reflexionskoeffizienten für Potentiale nach Abb. 33 nach (4.94a)

$$\mu(k) = 2 \arctan \frac{\sqrt{v_0 - k^2}}{k} \quad (4.97)$$

Bei einem solchen Potential mit unendlich hoher Wand bei gilt daher nach (3.24) für den Realteil des Resonanzpols ($\mu_1(k) = \pi$)

$$\tan ka = - \frac{k}{\sqrt{v_0 - k^2}} \quad (4.98)$$

Diese Gleichung hat dieselbe Form wie Gleichung (4.29a) für das Rechteckspotential in den Fällen II und III, wenn man v_0 mit κ_0^2 identifiziert.

Die Zerfallszeit wird nach (3.39) mit (4.97) und (4.95)

$$\frac{1}{\tau} = \underbrace{\frac{\hbar k}{m} \cdot \frac{1}{a + \frac{1}{\sqrt{v_0 - k^2}}}}_v \cdot D \quad (4.99)$$

Der Korrekturterm $1/\sqrt{v_0 - k^2}$ zur klassischen Formel ist wieder analog zum Korrekturterm $1/\mathcal{K}$ in (4.30).

Diese Korrektur kann bei Energien dicht unterhalb vom Maximum des Potentials und bei breitem Potential unter Einhaltung der Bedingungen (4.96) groß werden.

In diesem Fall kann man also mit Hilfe einer Näherungsmethode ohne Benutzung exakter Ergebnisse wesentliche Abweichungen der Zerfallszeit nach (3.39) von dem klassischen Wert (1.1) finden.

3) Bardeen-Methode

Bardeen /9/ hat für den Fall des Rechteckspotentials (4.1) eine Näherungsmethode zur Berechnung der Zerfallszeiten angegeben, die er auf den Fall des Tunnelns von Elektronen durch eine Oxidschicht zwischen zwei Supraleitern angewandt hat.

Bardeen definiert Anfangszustände φ_i und Endzustände φ_f durch Potentiale W_i und W_f nach Abb. 37, die durch gleich hohe Fortsetzung des Potentialwalles nach rechts oder links entstehen

$$\mathcal{H}_i \varphi_i = E_i \varphi_i, \quad \mathcal{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + W_i, \quad (4.100)$$

$$\mathcal{H}_f \varphi_f = E_f \varphi_f, \quad \mathcal{H}_f = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + W_f. \quad (4.101)$$

Mit

$$V_i = V - W_i \quad (4.102)$$

und der Zustandsdichte $\rho_f(E_i)$ der Endzustände findet Bardeen in Diracscher Näherung

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |(\varphi_f, V_i \varphi_i)|^2 \rho_f(E_i). \quad (4.103)$$

Dieses Ergebnis hat die Form des Feshbachschen Ausdrucks (2.161).

Mit

$$E_i = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \kappa = \sqrt{\kappa_0^2 - k^2} \quad (4.104)$$

lauten die Funktionen $\varphi_i(x)$

$$\varphi_i(x) = \begin{cases} A \sin k(x+a) & \text{für } x < 0 \\ A \sin ka e^{-xx} & \text{für } x > 0. \end{cases} \quad (4.105)$$

Aus der Differenzierbarkeit bei $x=0$ folgt die Eigenwertgleichung

$$\tan ka = -\frac{k}{x}. \quad (4.106)$$

Aus der Normierungsbedingung ergibt sich

$$A = \sqrt{\frac{2}{a + \frac{1}{x}}}. \quad (4.107)$$

Für die Funktion $\varphi_f(x)$ können wir die Randbedingung $\varphi_f(-a)=0$ durch $\varphi_f(-\infty)=0$ ersetzen, da die mit der zweiten Randbedingung berechnete Funktion bei $x=-a$ nur noch einen vernachlässigbar kleinen Wert hat. Die normierte Lösung der Schrödingergleichung für φ_f mit der Energie $E_f = E_1$ lautet

$$\varphi_f(x) = C(k) e^{x(x-b)} \quad \text{für } -a \leq x \leq b \quad (4.103a)$$

$$\varphi_f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (e^{-ikx} + r_f(k) e^{ikx}) \quad \text{für } b \leq x < \infty \quad (4.108b)$$

mit

$$C(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{-2ik}{x-ik} e^{-ik(a+b)}, \quad (4.108a)$$

$$T_f(k) = - \frac{k+ik}{k-ik} e^{-2ikb} \quad (4.109b)$$

Dieses Ergebnis kann man mit Hilfe der exakten Streulösungen für das Potential (4.1) auch als Näherung aus dem Feshbach-Formalismus gewinnen. Die Bardeenschen Zustände φ_f sind nur näherungsweise orthogonal zum Anfangszustand φ_i .

Mit (4.105) und (4.102) folgt für das Matrixelement

$$\begin{aligned} & (\varphi_i, V_i \varphi_i) \\ &= \frac{\hbar^2 k}{m} \cdot \frac{k}{x} \cdot A \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{2ik}{k+ik} e^{-ikb} e^{-xb} \end{aligned} \quad (4.110)$$

Mit

$$\rho_f(E) = \frac{m}{\hbar^2 k}$$

(4.111)

ergibt sich

$$\frac{1}{\tau} = \underbrace{\frac{\hbar k}{2m} \cdot \frac{1}{a + \frac{1}{x}}}_V \cdot \underbrace{\frac{16k^2 e^2 e^{-2xb}}{x_0^4}}_D \quad (4.112)$$

Die Eigenwertgleichung (4.106) und das Ergebnis (4.112) sind nach Abschnitt IV.1 nur für die Bereiche II und III in Abb. 23 richtig. Im Bereich I, also bei δ -ähnlichem Potential liefert die Bardeensche Methode den richtigen Frequenzfaktor V , aber die falsche Durchlässigkeit D . Im Bereich IV werden V und D falsch. Zu den beiden zuletzt genannten Fällen müßte man schon die Funktionen $\varphi_i(x)$ anders definieren.

Anhang

A. Integrals über C_0 und C_1

Das Integral über C_0 (Abb. 17) in (2.109) soll für das Potential (2.57) bei großen Zeiten asymptotisch entwickelt und für beliebige Zeiten abgeschätzt werden.

Mit (2.61a-b), (2.66), (2.67), (2.64) und (2.50) finden wir

$$\psi_a^k(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{2ik}{\alpha e^{2ika} - \alpha + 2ik} \quad \text{für } |x| < a. \quad (\text{A.1})$$

Mit (2.111) wird ($k_i = \frac{\pi}{a}$)

$$(\varphi_i, \psi_a^k(x)) = \frac{2k_i}{\sqrt{\pi a} (k_i^2 - k^2)} \sin ka \frac{2ik}{\alpha e^{2ika} - \alpha + 2ik}. \quad (\text{A.2})$$

Der Term $(\varphi_i, \psi_a^k)(\psi_a^k, \varphi_i)$ steigt nach (A.2) im Winkelbereich $0 > \arg k > -\frac{\pi}{4}$, abgesehen von Polstellen, höchstens exponentiell mit $|k|$ an. Führt man den Weg C_1 (Abb. 17) immer zwischen den Polen hindurch, so verschwindet das Integral über diesen Weg bei der Umformung von (2.106) für $t > 0$, da der zeitabhängige Faktor exponentiell mit $|k|^2$ abfällt. Für das Integral J_a in (2.109) gilt also

$$\begin{aligned} J_a &= \int_{C_0} dk e^{-\frac{iE(k)t}{\hbar}} (\varphi_i, \psi_a^k)(\psi_a^k, \varphi_i) \\ &= \frac{1}{\pi a} \int_{C_0} dk \frac{4k_i^2}{(k^2 - k_i^2)^2} \sin^2 ka \cdot \\ &\quad \cdot \frac{2ik}{\alpha e^{2ika} - \alpha + 2ik} \cdot \frac{-2ik}{\alpha e^{-2ika} - \alpha - 2ik} e^{-\frac{iE(k)t}{\hbar}}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Für große Zeiten, d.h. wegen der schnell abfallenden Exponentialfunktion in der Entwicklung der Skalarprodukte im Integranden für kleine k , wird daraus

$$J_a = \frac{4}{\pi \alpha^2 a} \frac{1}{k_i^2} \int_{c_0} dk \left(k^2 + \frac{2k^4}{k_i^2} \right) e^{-i \frac{k^2 t}{2m}}. \quad (A.4)$$

Mit der Substitution

$$k \sqrt{\frac{kt}{2m}} = e^{-\frac{i\pi}{4}} u \quad (A.5)$$

geht (A.4) über in

$$J_a = \frac{4}{\pi \alpha^2 a} \cdot \frac{1}{k_i^2} \int dk \left(\left(\frac{2m}{kt} \right)^{3/2} u^2 e^{-\frac{3i\pi}{4}} - \left(\frac{2m}{kt} \right)^{5/2} \frac{u^4 e^{-\frac{5i\pi}{4}}}{k_i^2} \right) e^{-u^2}. \quad (A.6)$$

Mit (2.75, (2.116) und $k_p = k_p' - i k_p''$ wird daraus

$$J_a = \frac{2 e^{-\frac{i\pi}{4}}}{\pi} \left[-i \left(\frac{4 k_p''}{k_p'} \right)^{5/2} \left(\frac{\tau}{t} \right)^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{2} - \left(\frac{4 k_p''}{k_p'} \right)^{7/2} \left(\frac{\tau}{t} \right)^{5/2} \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \right]. \quad (A.7)$$

Diese Entwicklung ist gut, wenn der zweite Term klein gegen den ersten ist, d.h. für

$$\frac{\tau}{t} \cdot \frac{4k_p''}{k_p'''} \cdot \frac{3}{2} \ll 1. \quad (\text{A.8})$$

Bei einer scharfen Resonanz ist diese Bedingung wegen des kleinen Faktors $k_p''/k_p''' \ll 1$ schon für Zeiten $t \ll \tau$ erfüllt.

Wir schätzen nun das Integral (A.3) für alle Zeiten ab. Wegen des abfallenden Exponentialfaktors $e^{-\frac{iE(k)t}{\hbar}}$ gilt ⁺⁾

$$\begin{aligned} |J_a| &= \left| \int_{C_0} dk e^{-\frac{iE(k)t}{\hbar}} (\varphi_i, \psi_a^k) (\psi_a^k, \varphi_i) \right| \\ &\leq \left| \int_{C_0} dk |(\varphi_i, \psi_a^k) (\psi_a^k, \varphi_i)| \right|. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Aus (A.3) und aus

$$\sin ka = \frac{e^{ika}}{2i} (1 - e^{-2ika})$$

folgt

$$(\varphi_i, \psi_a^k) (\psi_a^k, \varphi_i) = \frac{1}{\pi a \alpha^2} \cdot \frac{4k_i^2 k^2}{(k^2 - k_i^2)^2} g_1(k) g_2(k) \quad (\text{A.10})$$

⁺⁾ Die Betragsstriche haben hier auch für komplexe k die übliche Bedeutung, nicht die in der Fußnote nach (2.113) eingeführte.

mit

$$g_1(k) = \frac{e^{2ika} (1 - e^{-2ika})}{e^{2ika} - 1 + \frac{2ik}{\alpha}} \quad (\text{A.11})$$

und

$$g_2(k) = \frac{e^{-2ika} - 1}{e^{-2ika} - 1 - \frac{2ik}{\alpha}} \quad (\text{A.12})$$

Bei großem α ist in

$$g_1(k) = \frac{1}{1 + \frac{2ik}{\alpha} \cdot \frac{e^{-2ika}}{1 - e^{-2ika}}} \quad (\text{A.13})$$

der zweite Term im Nenner für k auf C_0 immer klein gegen eins:
Für $k \rightarrow 0$ hat dieser Term den Grenzwert $(\alpha a)^{-1}$, für $k \rightarrow e^{-\frac{i\pi}{4}}, \infty$, fällt er exponentiell ab. Für endliche k bleibt der Term von der Größenordnung $1/\alpha$. Es gilt also

$$g_1(k) \approx 1 - \frac{2ik}{\alpha} \cdot \frac{e^{-2ika}}{1 - e^{-2ika}} \approx 1. \quad (\text{A.14})$$

Für

$$g_2(k) = \frac{1}{1 - \frac{2ik}{\alpha(e^{-2ika} - 1)}} \quad (\text{A.15})$$

ist bei großem $|k|$ mit $\arg k = -\frac{\pi}{4}$ eine analoge Entwicklung nach $1/\alpha$ nicht möglich. Wir schätzen daher den Ausdruck (A.15) für alle k auf C_0 ab.

Mit $k = (1-i)\kappa$ und $\kappa > 0$ gilt

$$\begin{aligned} & \operatorname{Re} \frac{-2ik}{\alpha(e^{-2ika} - 1)} \\ &= \frac{2\kappa}{\alpha |e^{-2i\kappa a} e^{-2\kappa a} - 1|^2} \{1 - e^{-2\kappa a} (\sin 2\kappa a - \cos 2\kappa a)\}. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Der zweite Term in der geschweiften Klammer ist größer oder gleich (-1) . Das bedeutet, daß der Realteil des Nenners von (A.15) größer oder gleich eins ist, d.h.

$$|g_2(k)| \leq 1. \quad (\text{A.17})$$

Mit (A.9), (A.10), (A.14) und (A.17) findet man bis auf Terme der Ordnung

$$|J_a| \leq \frac{4k_i^2}{\alpha^2 \pi a} \left| \int_{C_0} \left| \frac{4k^2}{(k^2 - k_i^2)^2} \right| dk \right|, \quad (\text{A.18})$$

oder mit $k = u e^{-\frac{i\pi}{4}}$

$$|J_a| \leq \frac{4k_i^2}{\pi a \alpha^2} \int_0^\infty du \frac{u^2}{u^4 + k_i^4} = \frac{8\sqrt{2}\pi}{3\kappa^2 a^2} \ll 1. \quad (\text{A.19})$$

B. Streulösungen am Rechteckspotential

Wir berechnen die Koeffizienten der Streulösung (4.4) für das Rechteckspotential nach Abb. 22.

Mit dem Ansatz (4.4a), (4.4c) und

$$\bar{\psi}_k(x) = l_1 \cosh x(x-b) + l_2 \sinh x(x-b) \quad \text{für } 0 < x < a \quad (\text{B.1})$$

lauten die Bedingungen für Stetigkeit und Differenzierbarkeit bei $x=0$ und $x=b$

$$1 + r(k) = l_1 \cosh xb - l_2 \sinh xb \quad (\text{B.2})$$

$$1 - r(k) = -x l_1 \sinh xb + l_2 x \cosh xb \quad (\text{B.3})$$

$$l_1 = d(k) e^{ikb} \quad (\text{B.4})$$

$$x l_2 = ik d(k) e^{ikb}. \quad (\text{B.5})$$

Daraus folgt

$$l_2 = \frac{ik}{x} l_1. \quad (\text{B.6})$$

Damit wird aus (B.2) und (B.3)

$$1 + r(k) = l_1 \left(\cosh xb - \frac{ik}{x} \sinh xb \right) \quad (\text{B.7})$$

$$1 - r(k) = l_1 \left(\frac{ik}{x} \sinh xb + \cosh xb \right). \quad (\text{B.8})$$

Es ergibt sich aus (B.7) und (B.8) mit ε und η nach (4.3)

$$l_1 = \frac{1}{\cosh \kappa b + \frac{i\varepsilon}{2} \sinh \kappa b}, \quad (\text{B.9})$$

$$r(k) = l_1 \left(-\frac{i\gamma}{2} \sinh \kappa b \right) \quad (\text{B.10})$$

Einsetzen dieser Ergebnisse in (B.4), (B.5) und (B.6) liefert (4.5) und (4.4b) mit (B.1).

C. Streulösungen für das Dreieckspotential

Wir berechnen die Streulösungen zum Dreieckspotential (4.46).

Die Schrödingergleichung

$$-\partial_x^2 \bar{\psi}(x) + v_0 \left(1 - \frac{x}{b}\right) \bar{\psi}(x) = k^2 \bar{\psi}(x) \quad \text{für } 0 \leq x \leq b \quad (\text{C.1})$$

geht durch die Transformation

$$\xi = \left(\frac{b}{v_0}\right)^{2/3} \left(v_0 - k^2 - \frac{v_0 x}{b}\right) \quad (\text{C.2})$$

über in

$$\partial_\xi^2 \bar{\psi} - \xi \bar{\psi} = 0.$$

Linear unabhängige Lösungen dieser Differentialgleichung sind die Airy-Funktionen $A_i(\xi)$ $B_i(\xi)$ (Abramowitz, Stegun/6/).

Mit der Wronski-Determinante

$$A_i(\xi) B_i'(\xi) - B_i(\xi) A_i'(\xi) = \frac{1}{\pi} \quad (\text{C.3})$$

findet man für Linearkombination (4.48e)

$$\partial_x \bar{\varphi}(\xi, \xi_b) \Big|_{x=b} = i k \bar{\varphi}(\xi_b, \xi_b) \quad (\text{C.4})$$

$$\bar{\varphi}(\xi_b, \xi_b) = \frac{1}{\pi} \quad (\text{C.5})$$

Wegen (C.4) und (C.5) sind die Stetigkeits- und Differenzierbarkeitsbedingung bei $x=b$ erfüllt, wenn man ansetzt

$$\bar{\psi}_k(x) = e^{ikx} + r(k) e^{-ikx} \quad \text{für } x < 0 \quad (\text{C.6a})$$

$$\bar{\psi}_k(x) = \pi d(k) e^{ikb} \bar{\varphi}(\xi, \xi_b) \quad \text{für } 0 < x < b \quad (\text{C.6b})$$

$$\bar{\psi}_k(x) = d(k) e^{ikx} \quad \text{für } x > b. \quad (\text{C.6c})$$

Aus den Bedingungen der Stetigkeit und Differenzierbarkeit bei $x=0$

$$1+r(k) = \pi d(k) e^{ikb} \bar{\varphi}(\xi_0, \xi_b) \quad (\text{C.7a})$$

$$1-r(k) = i\pi d(k) e^{ikb} \frac{1}{\sqrt{-\xi_b}} \bar{\varphi}'(\xi_0, \xi_b) \quad (\text{C.7b})$$

folgen die Ergebnisse (4.49).

Anhang D

Nullstellen von $g(K)$

Ausgehend von den Lösungen k_0 von (3.24) berechnen wir die Nullstellen der Funktion $g(k)$ nach (3.21) in der Entwicklung nach Potenzen von $D(k_0)$ bis zur zweiten Ordnung. Wir setzen also für die Nullstelle an

$$K = k_0 + \alpha D + \beta D^2 \quad (\alpha, \beta = \text{const.}). \quad (\text{D.1})$$

Die Taylorentwicklung von $g(K)$ um k_0 bis zur zweiten Ordnung liefert dann

$$g(K) = g(k_0) + (\alpha D + \beta D^2) g'(k_0) + \frac{1}{2} \alpha^2 D^2 g''(k_0). \quad (\text{D.2})$$

Aus (3.21) folgt

$$g'(k) = -e^{i\psi(k)} (\partial_k |\tau_1(k)| + i |\tau_1(k)| \psi'(k)), \quad (\text{D.3})$$

$$g''(k) = -e^{i\psi(k)} (\partial_k^2 |\tau_1(k)| + 2i \psi'(k) \partial_k |\tau_1(k)| + i |\tau_1(k)| \psi''(k) - |\tau_1(k)| \psi'^2(k)). \quad (\text{D.4})$$

(D.3) und (D.4) liefern mit (3.12), (3.13) in erster Ordnung ⁺)

⁺) Dabei werden Terme, die proportional zu den Ableitungen $D'(k_0)$, $D''(k_0)$ sind, als klein von derselben Ordnung wie $D(k_0)$ angesehen.

$$g'(k_0) = -i\psi'(k_0) + \frac{D'(k_0)}{2} + i \frac{D(k_0)}{2} \psi'(k_0) \quad (D.5)$$

und in nullter Ordnung

$$g''(k_0) = -\frac{i\psi''(k_0)}{2} + \frac{\psi'^2(k_0)}{2} . \quad (D.6)$$

Durch Einsetzen von (D.5) und (D.6) in (D.2) und Koeffizientenvergleich finden wir

$$\alpha = -\frac{i}{2\psi'(k_0)} \quad (D.7)$$

$$\beta = -\frac{i}{2\psi'(k_0)} \left(\frac{1}{2} - \frac{iD'(k_0)}{2D(k_0)\psi'(k_0)} + \frac{iD(k_0)}{4} \cdot \frac{\psi''(k_0)}{\psi'^2(k_0)} \right) \quad (D.8)$$

Einsetzen von (D.7) und (D.8) in (D.1) ergibt

$$K = k_0 - \frac{iD(k_0)}{2\psi'(k_0)} \left(1 + \frac{D(k_0)}{2} - \frac{i}{2} \cdot \frac{D'(k_0)}{\psi'(k_0)} + \frac{iD(k_0)}{4} \cdot \frac{\psi''(k_0)}{\psi'^2(k_0)} \right) \quad (D.9)$$

Herrn Prof. G. Leibfried und Herrn Dr. K. Dettmann danke ich für zahlreiche anregende und nützliche Diskussionen.

L i t e r a t u r :

- /1/ Messiah, A.: Quantum Mechanics,
North-Holland Publishing Company, Amsterdam 1961
- /2/ Schiff, L.I.: Quantum Mechanics
Int. Series in Pure and Applied Physics, 1955
- /3/ Landau, L.P., Lifshitz, E.M.: Lehrbuch der theoretischen
Physik, Bd. 3, Quantenmechanik
Akademie-Verlag, Berlin 1966
- /4/ Goldberger, M.L., Watson, M.W.: Collision Theory,
Wiley, New York, London, Sydney 1964
- /5/ Geltman, S.: Topics in Atomic Collision Theory
Academic Press, New York - London 1968
- /6/ Abramowitz, M., Stegun, I.A.: Handbook of Mathematical
Functions
Dover, New York 1965
- /7/ Höhler, G.: Z. Phys. 152, 546-565 (1958)
- /8/ Feshbach, H.: Ann. Phys. (USA), 5, 357 (1958), Ann. Phys.
(USA) 19, 287 (1962)
- /9/ Bardeen, J.: Phys. Rev. Letters 6, No. 2, 57 (1961)
- /10/ Langer, R.E.: Phys. Rev. 51, 669 (1937)
- /11/ Kramers, : Z. Phys. 39, 829 (1926)

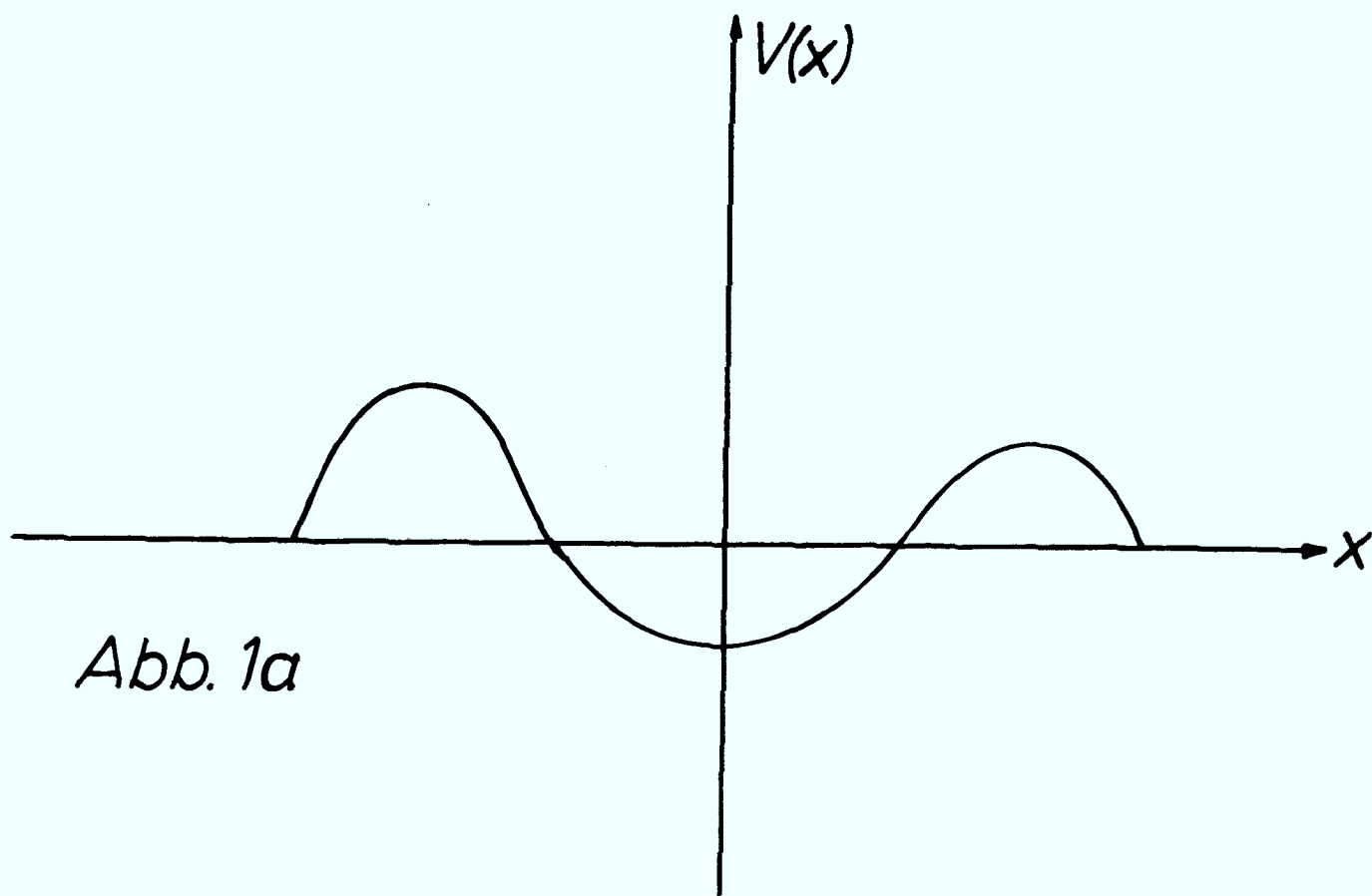


Abb. 1a

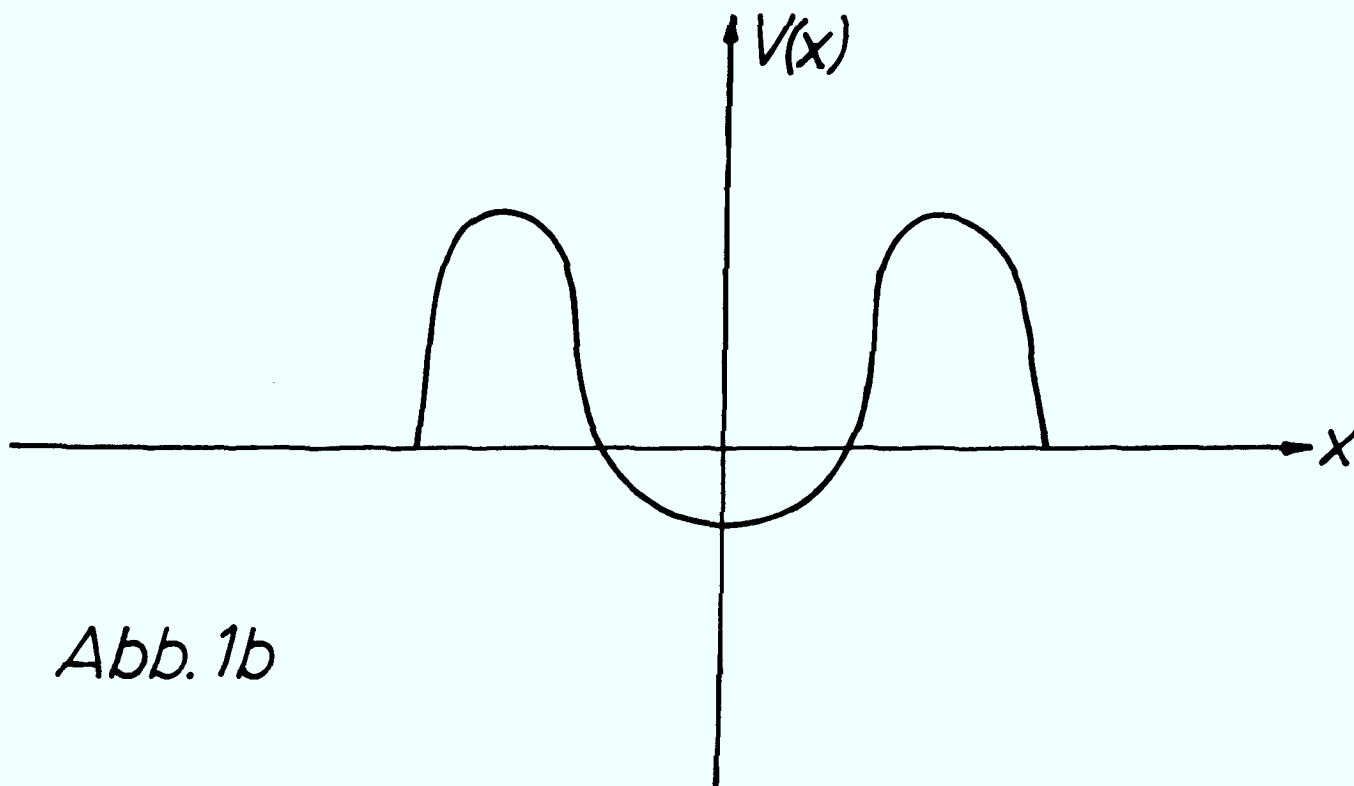


Abb. 1b

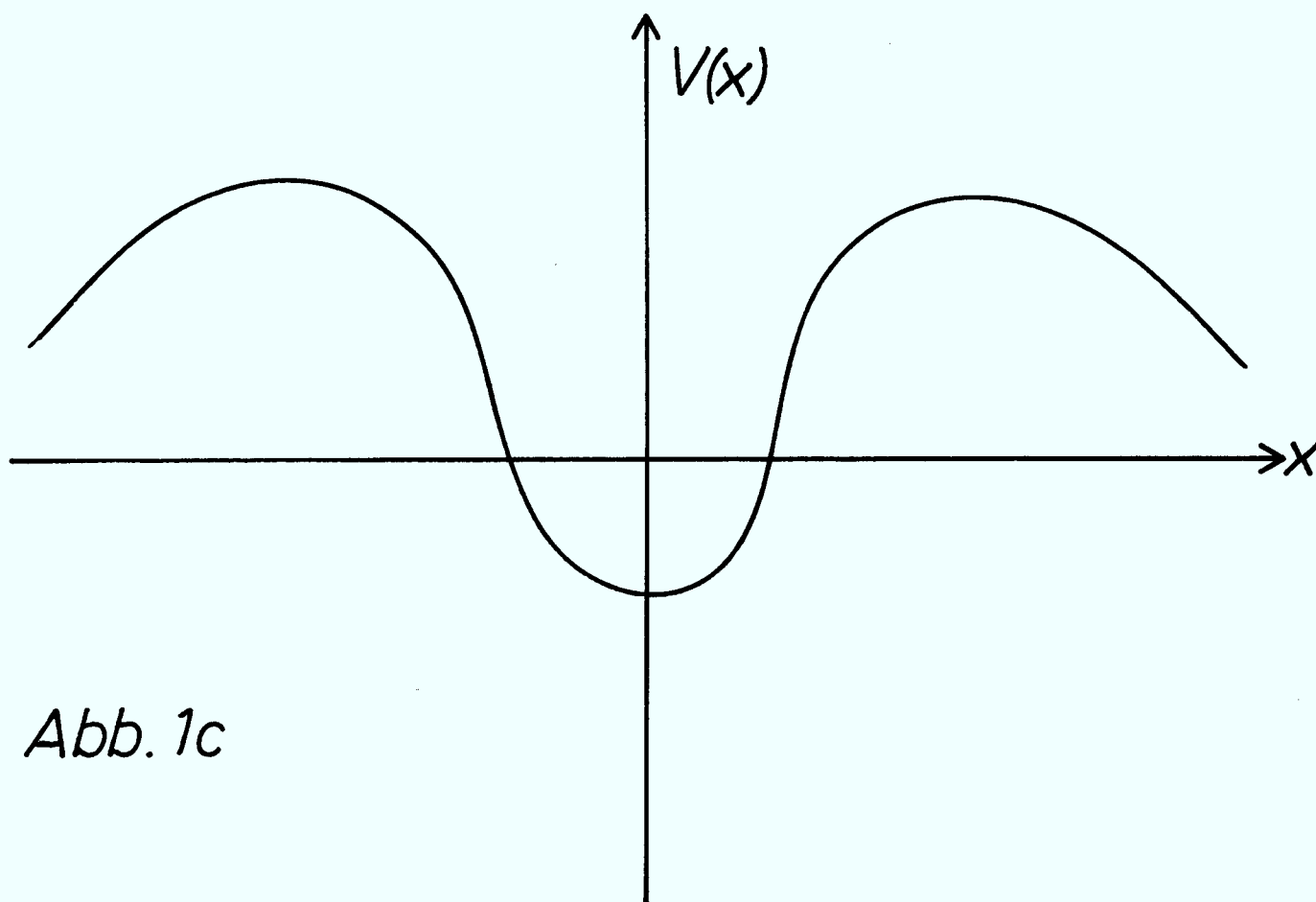


Abb. 1c

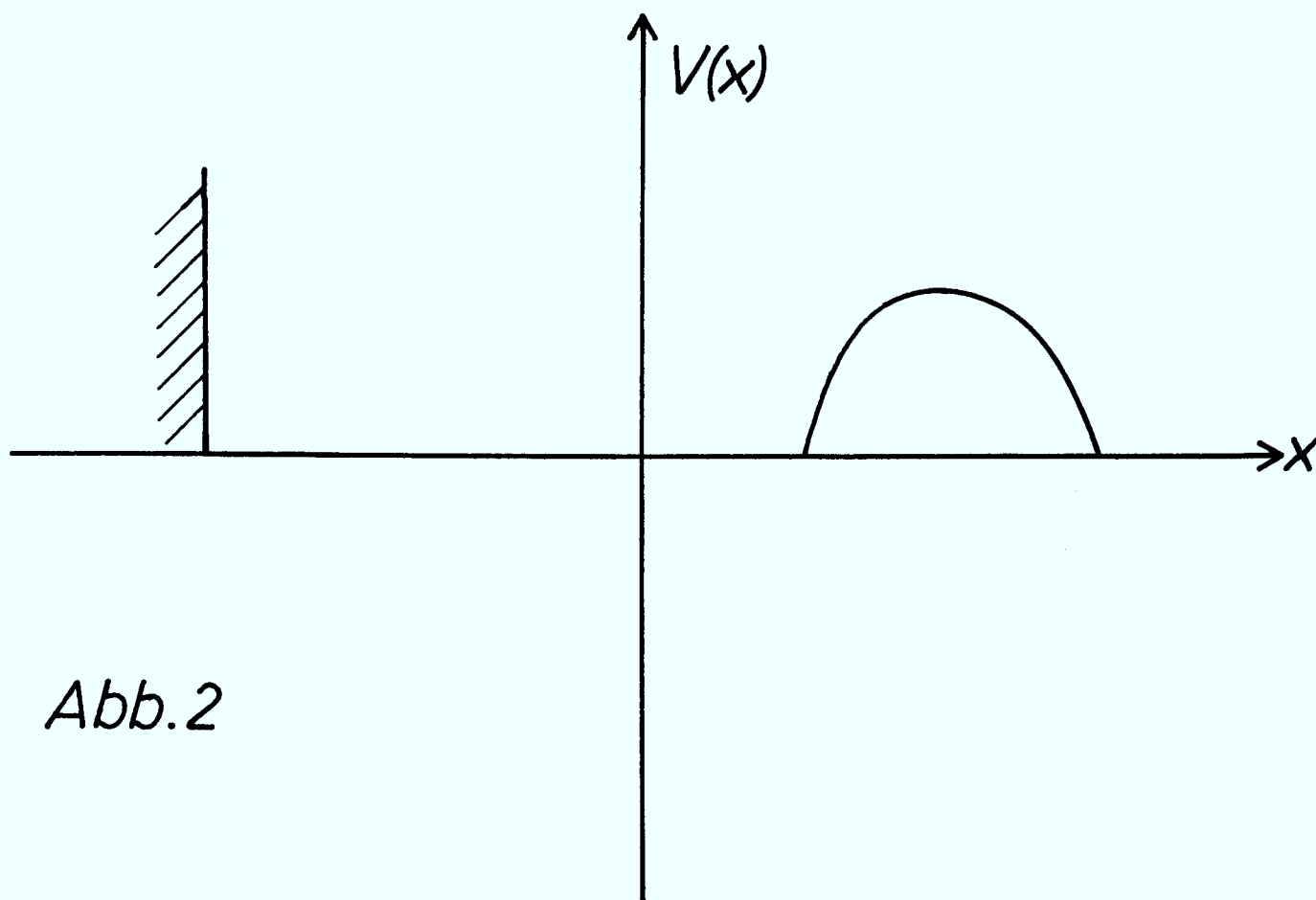


Abb. 2

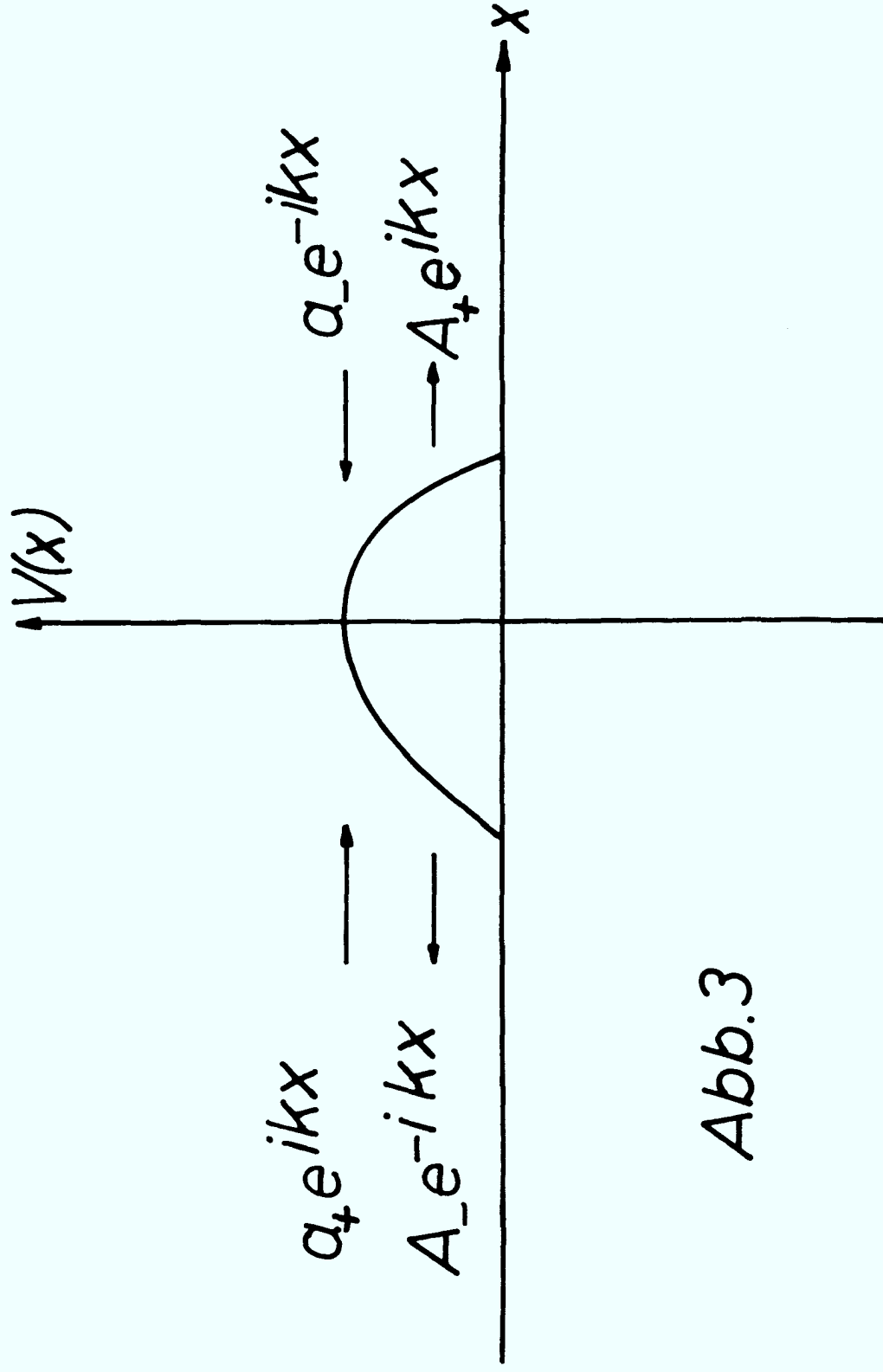
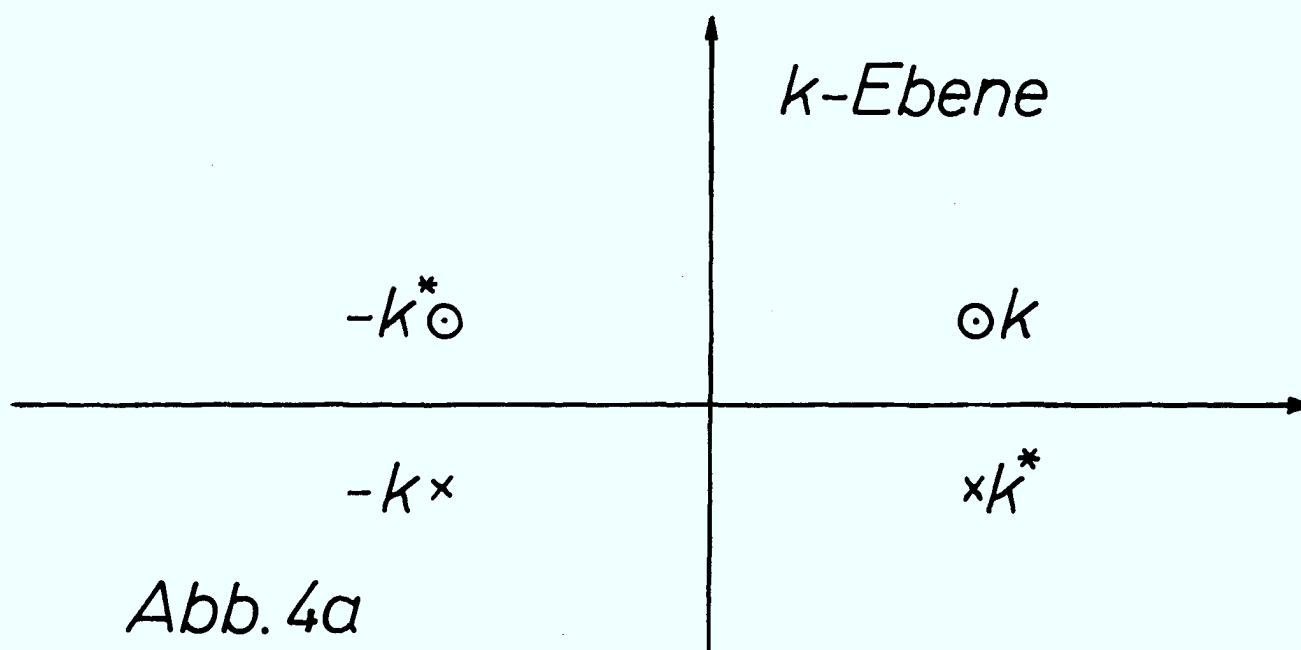


Abb. 3



$E\text{-Fläche}$

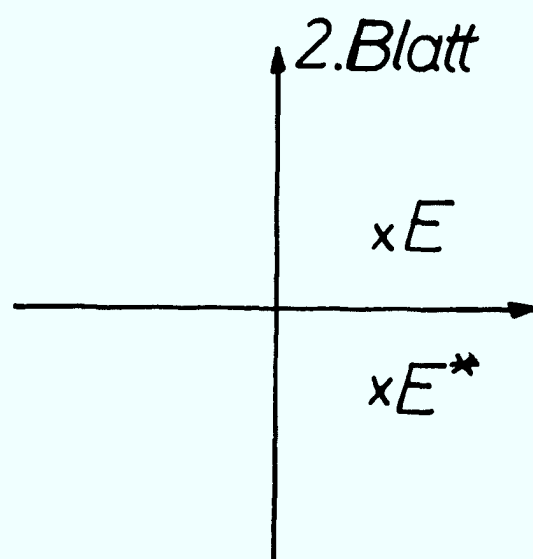
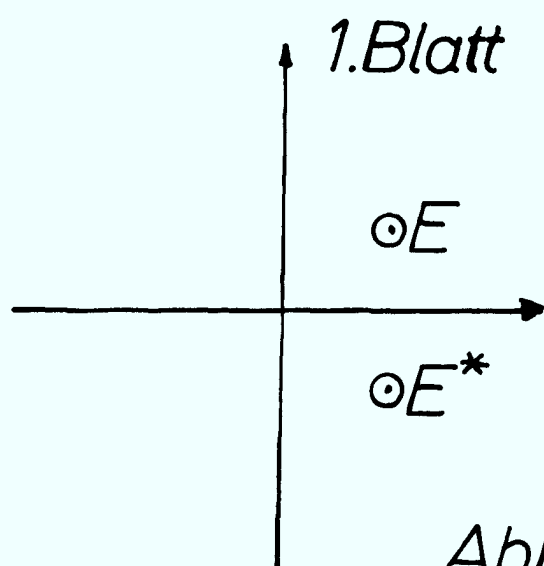


Abb. 4b

K-Ebene

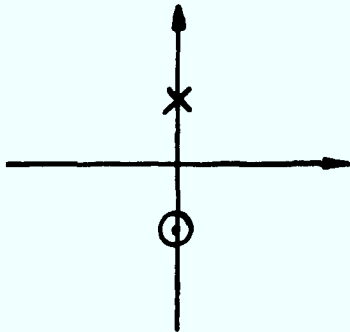


Abb. 5a

E-Fläche

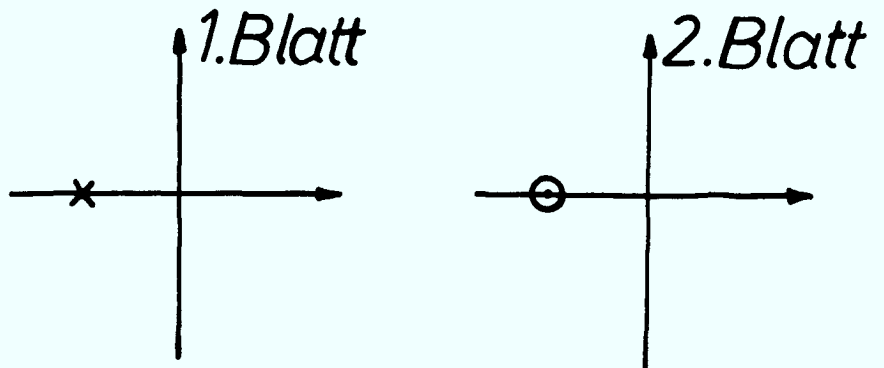


Abb. 5b

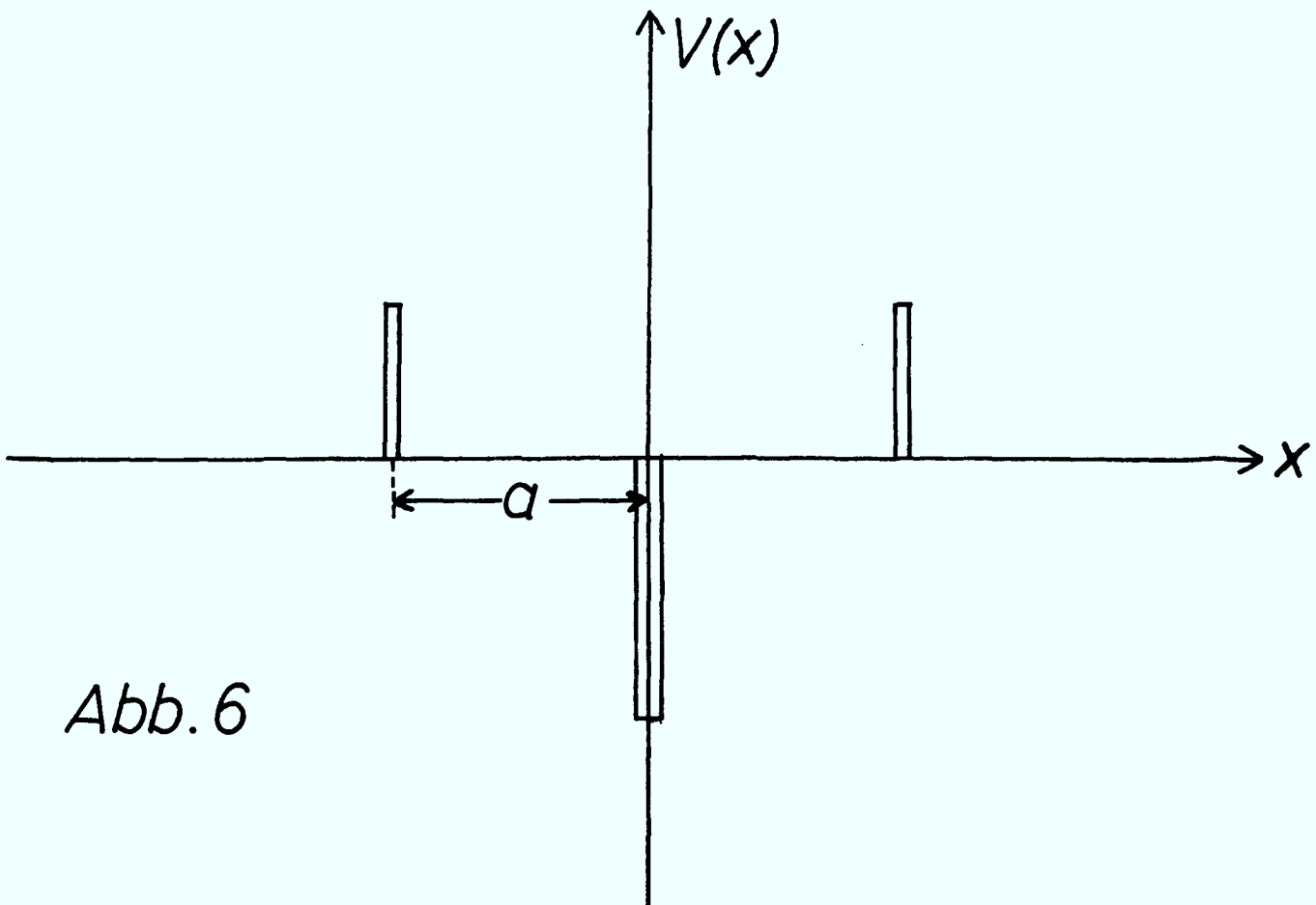


Abb. 6

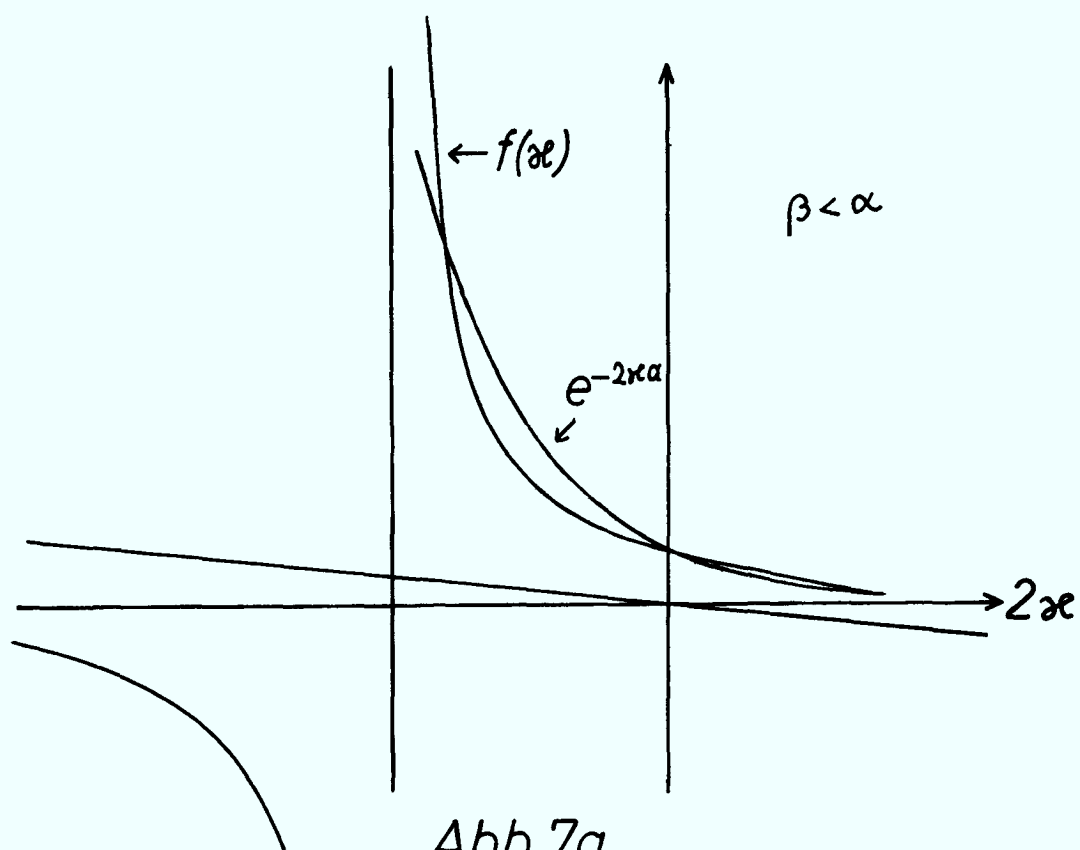


Abb. 7a

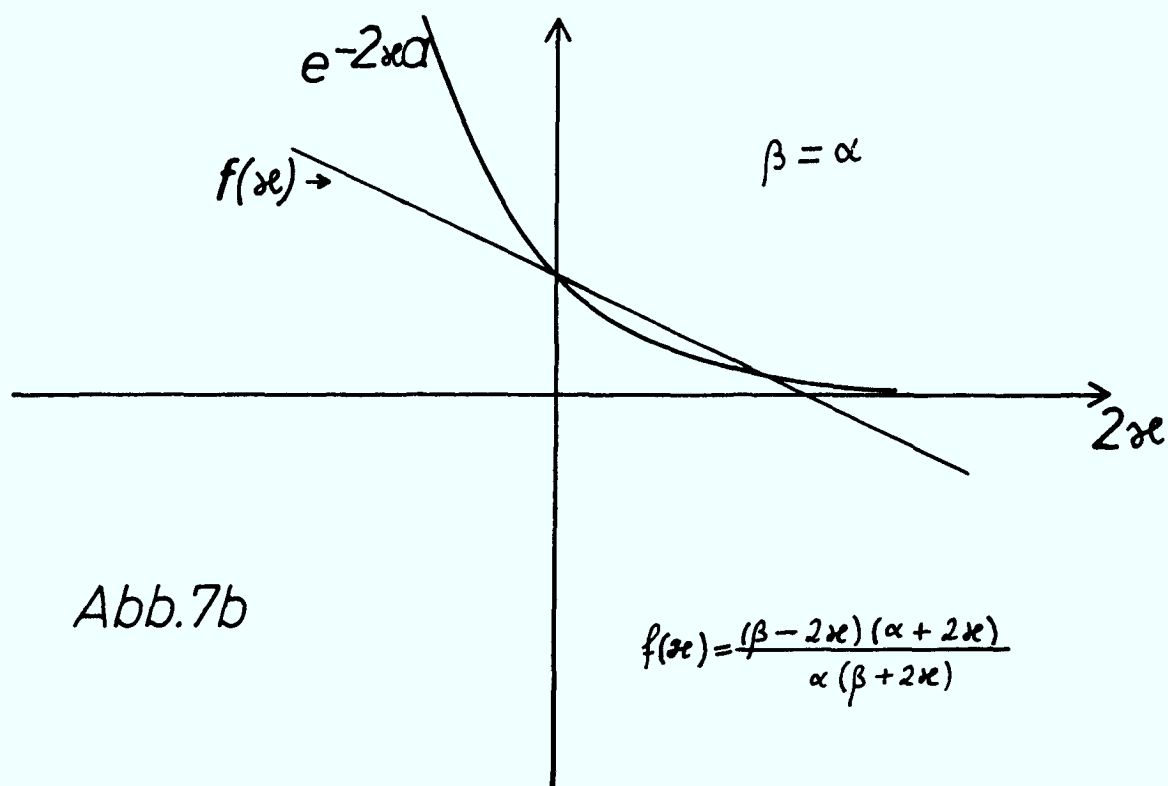


Abb. 7b

$$f(x) = \frac{(\beta - 2x)(\alpha + 2x)}{\alpha(\beta + 2x)}$$

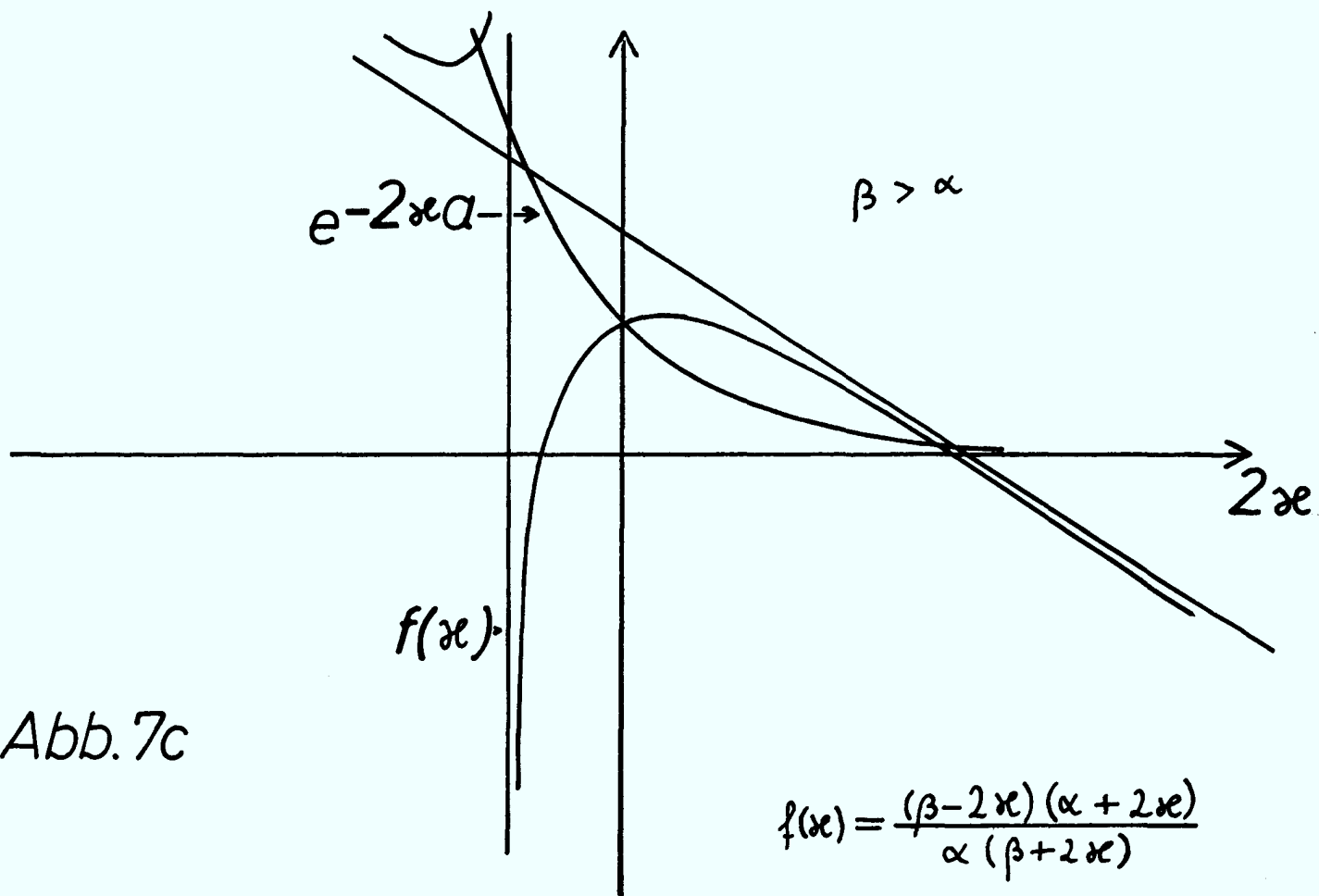


Abb. 7c

K-Ebene

E-Fläche

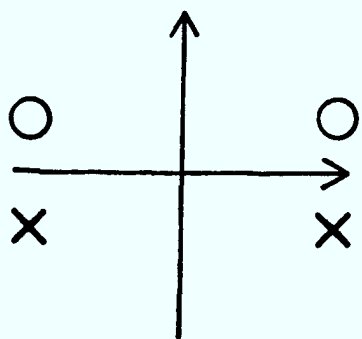


Abb. 8a

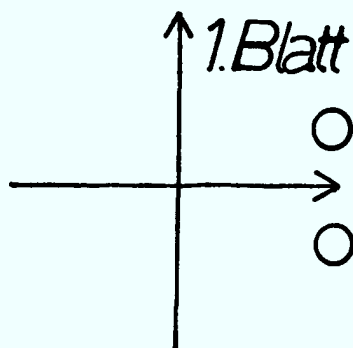
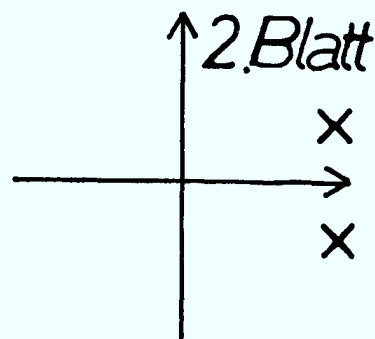


Abb. 8b



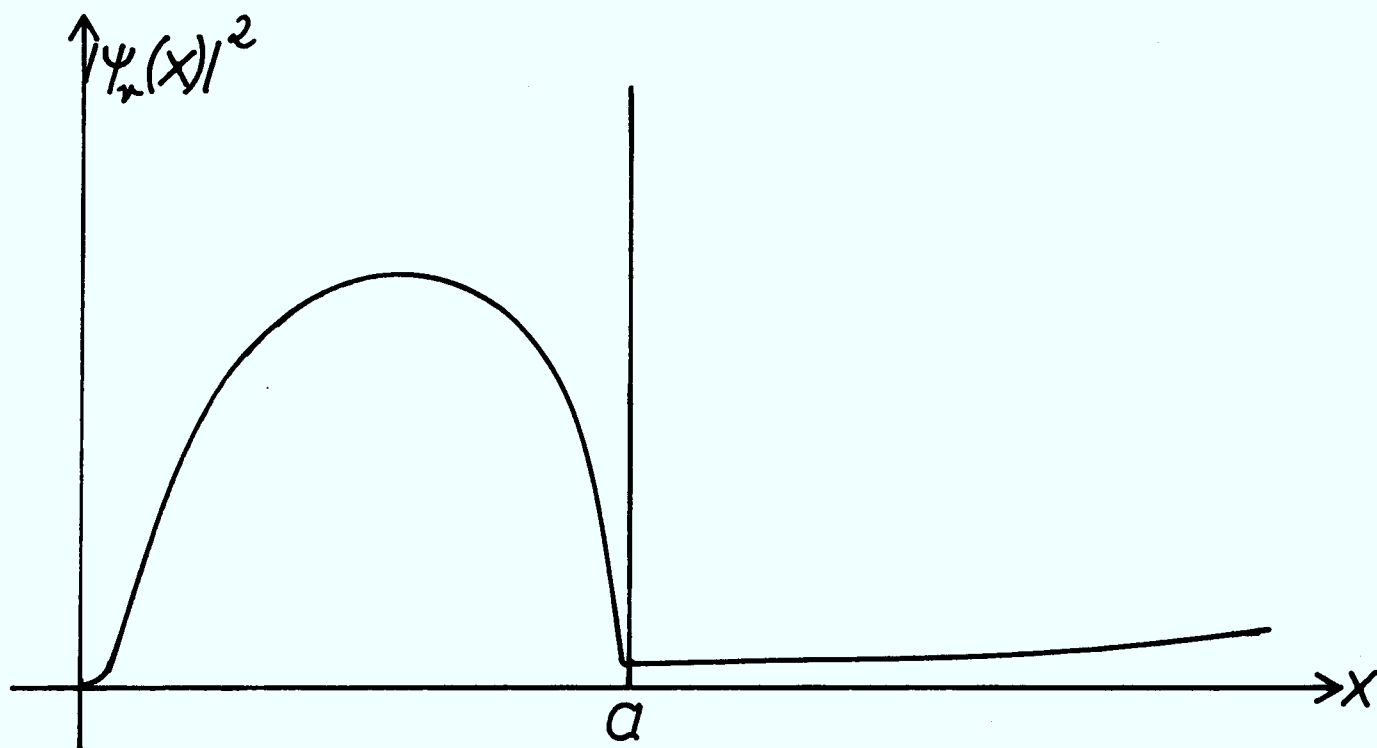


Abb. 9

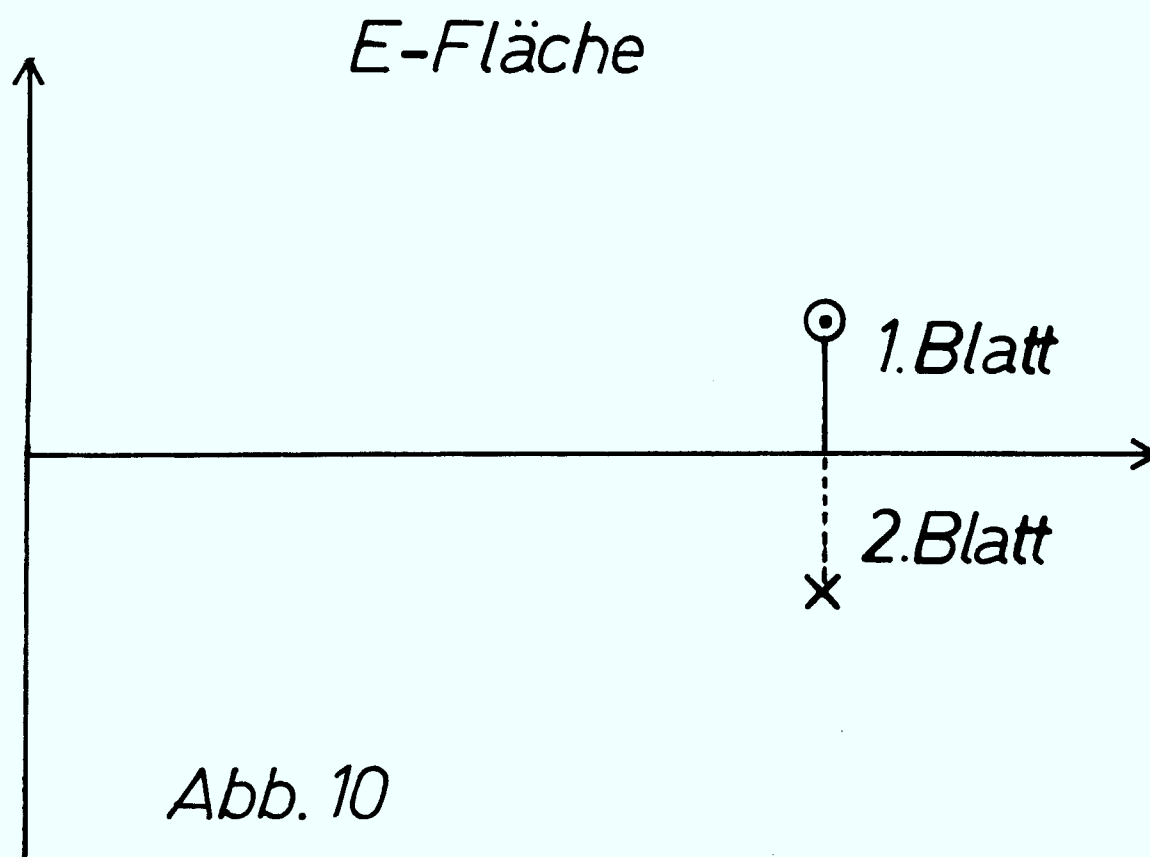


Abb. 10

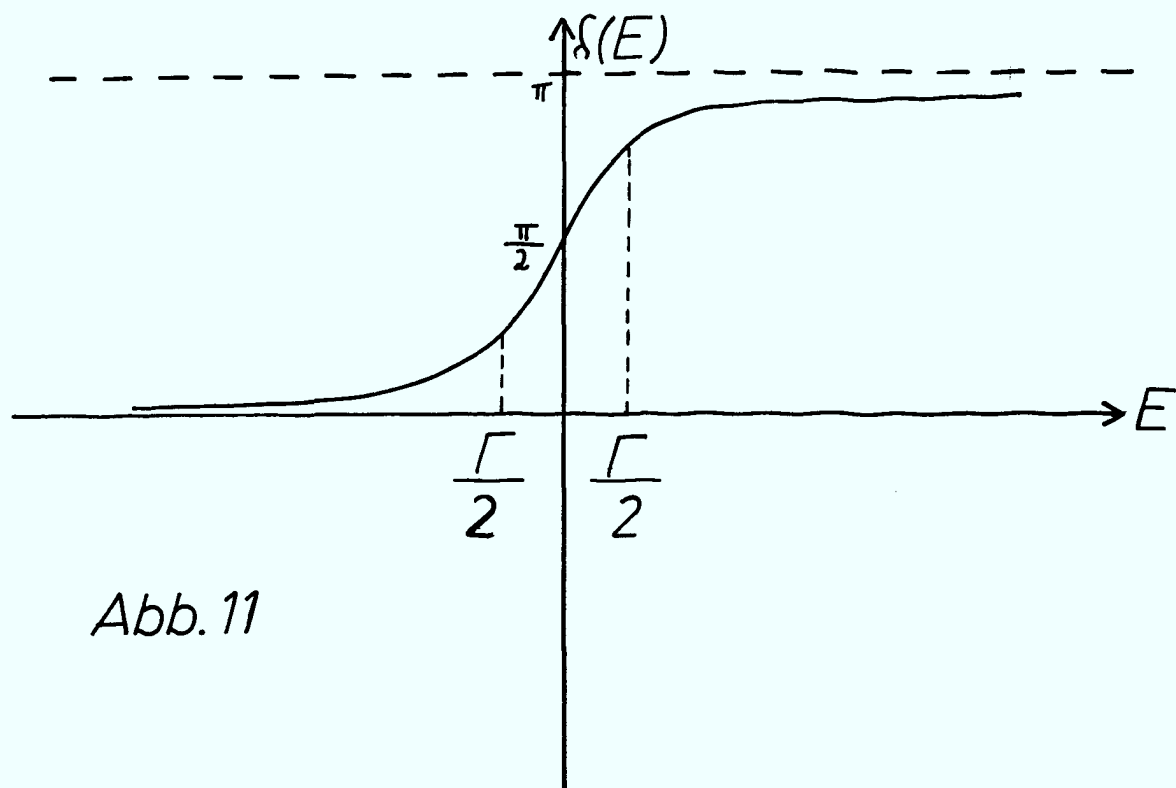


Abb. 11

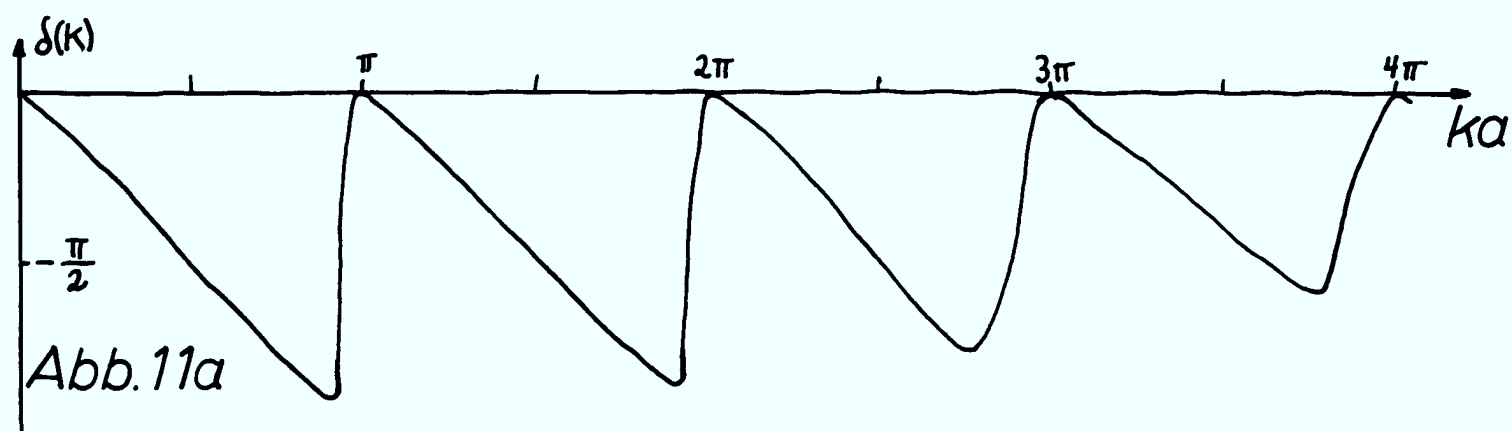


Abb. 11a

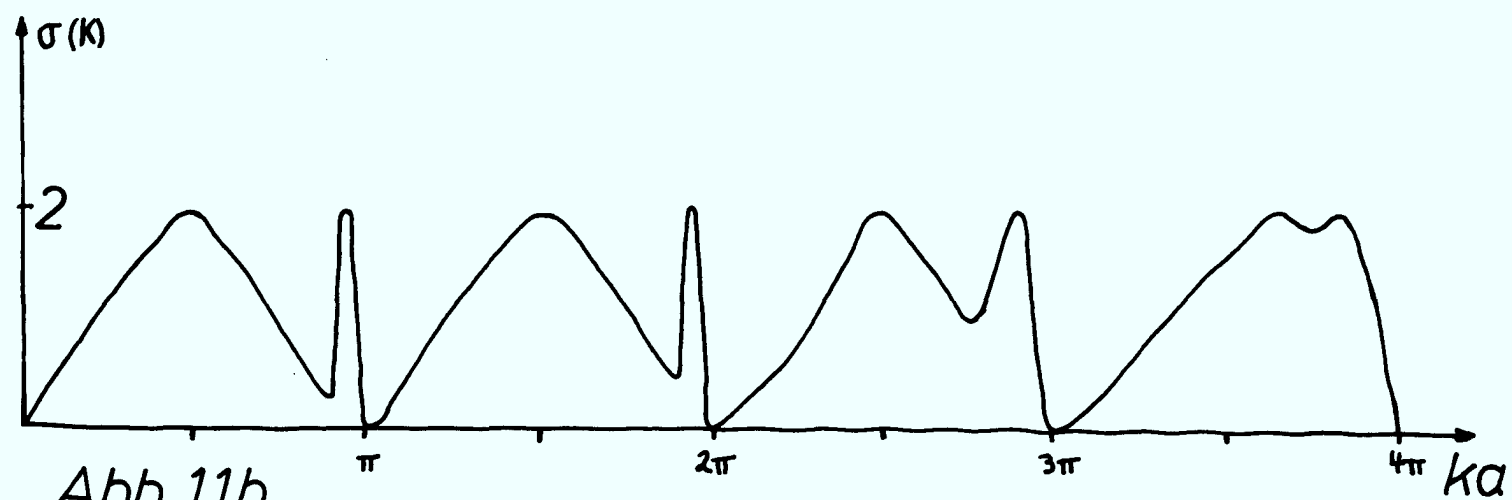


Abb. 11b

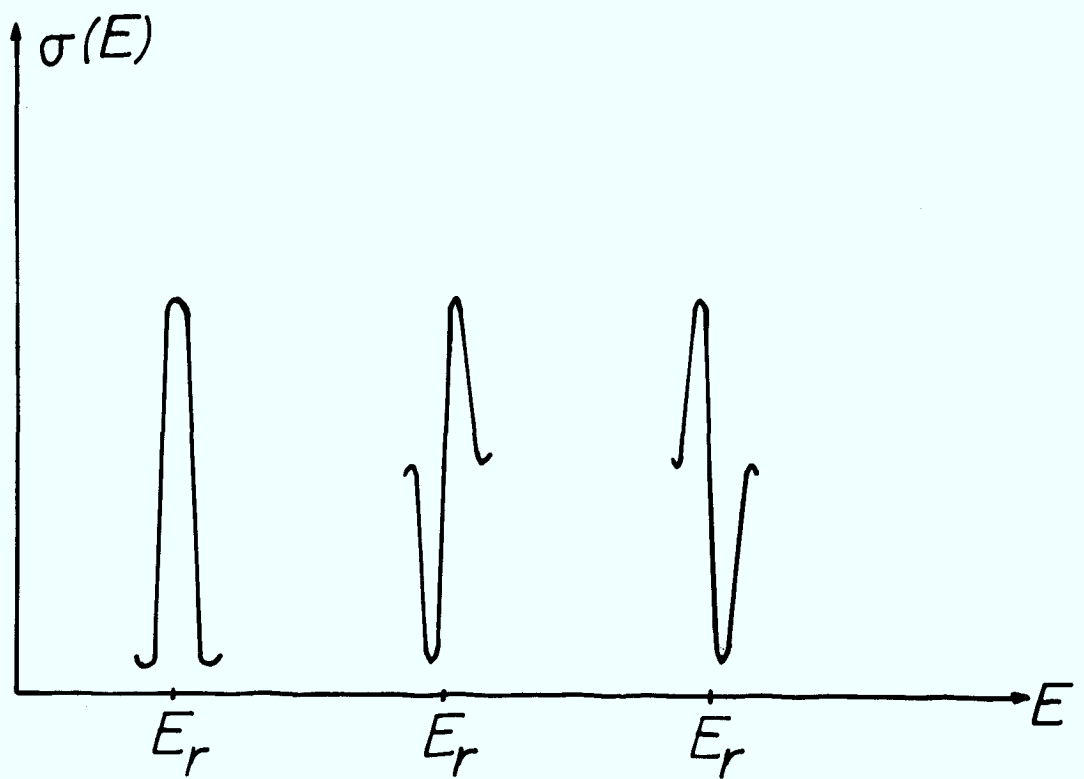
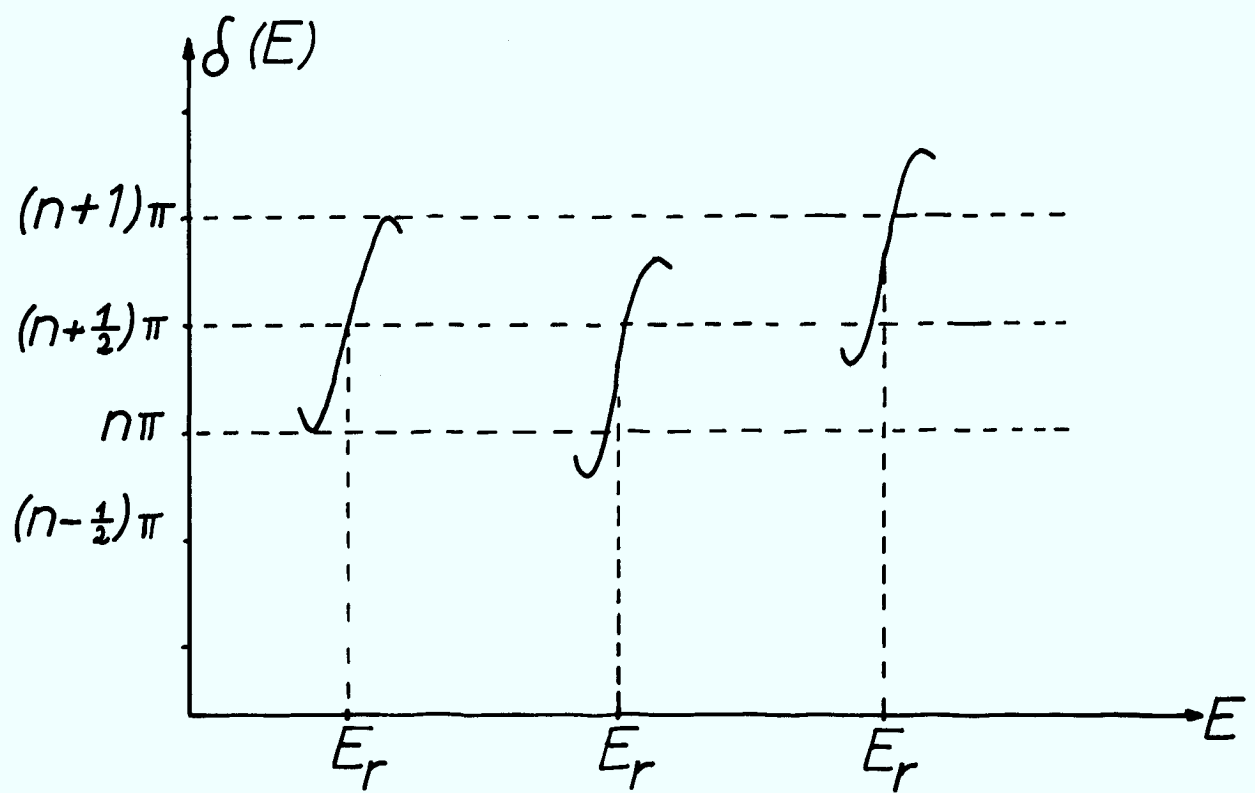


Abb. 12

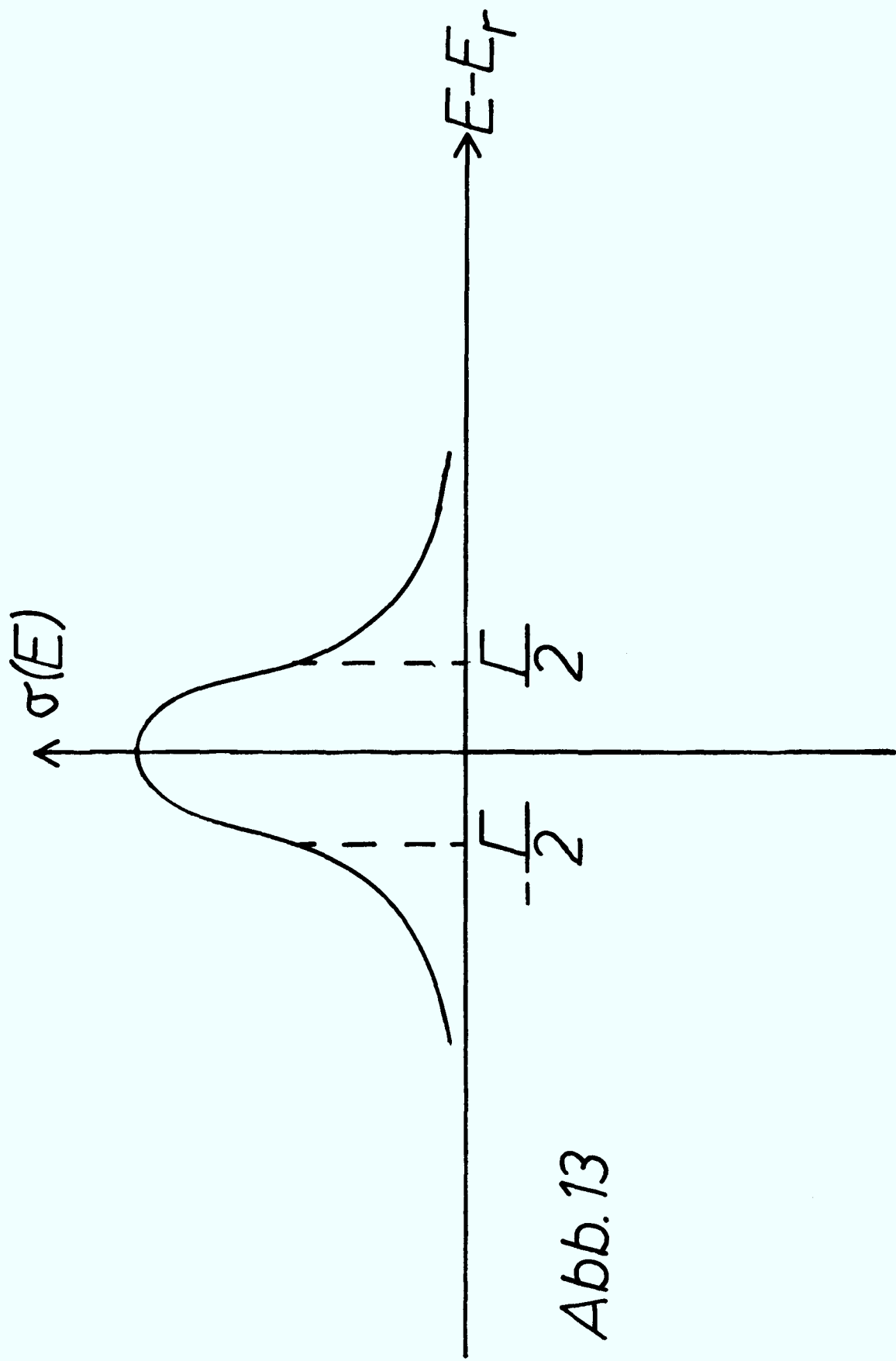


Abb. 13

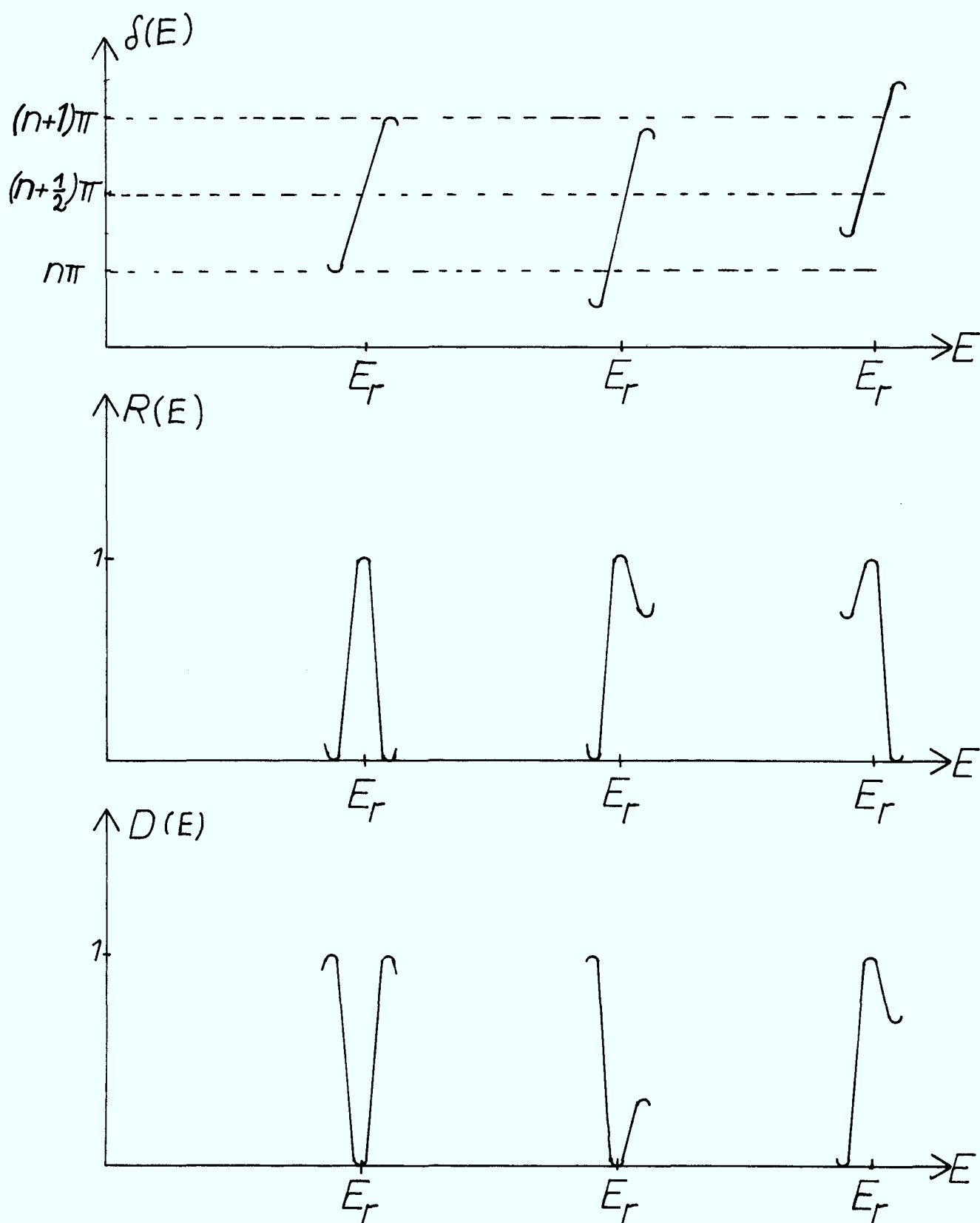


Abb. 14

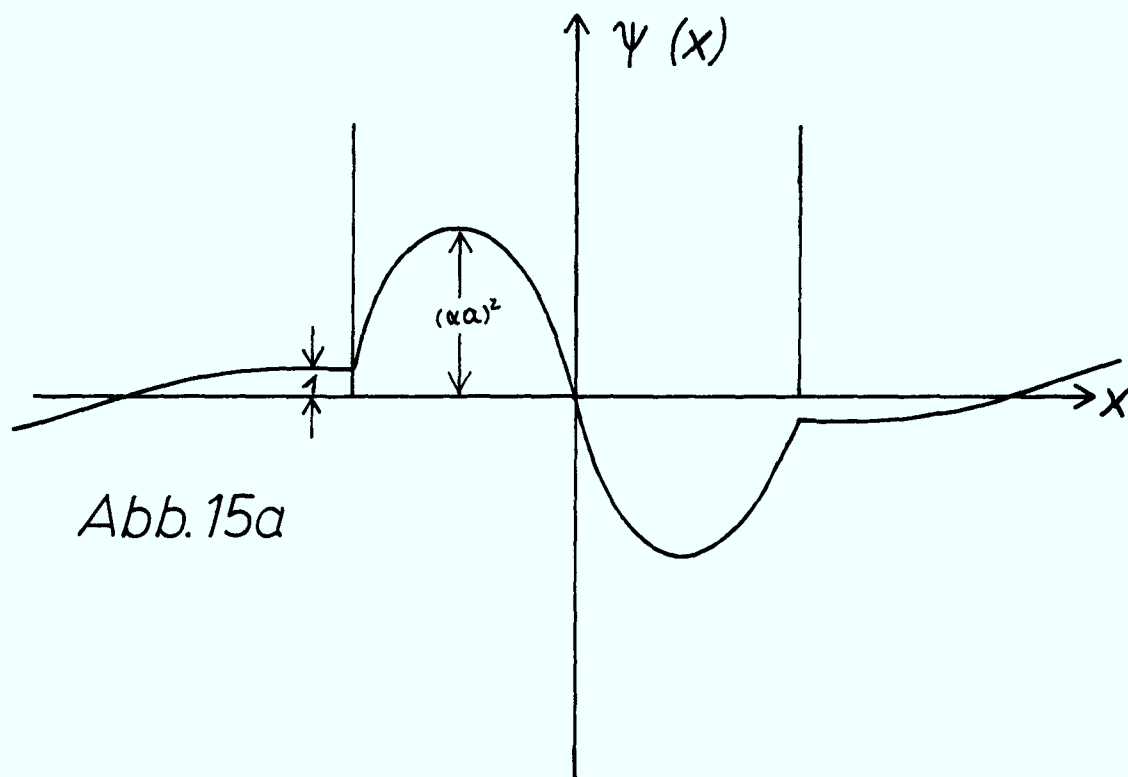


Abb. 15a

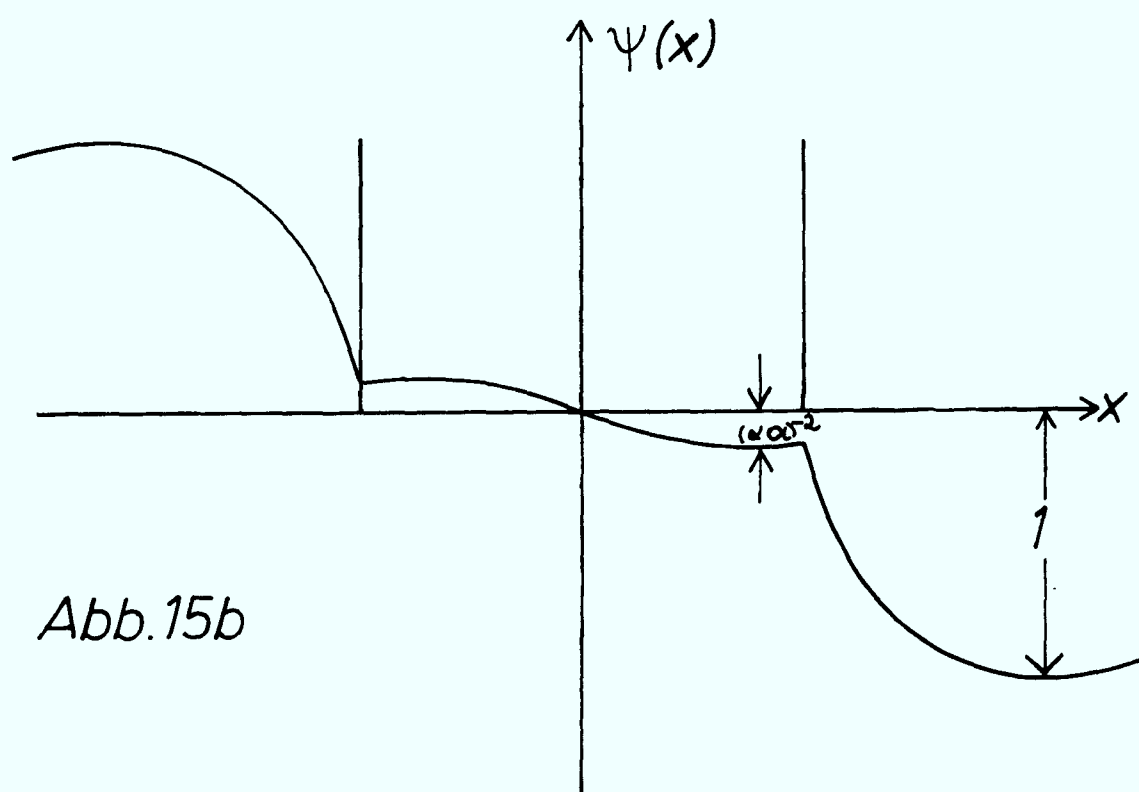


Abb. 15b

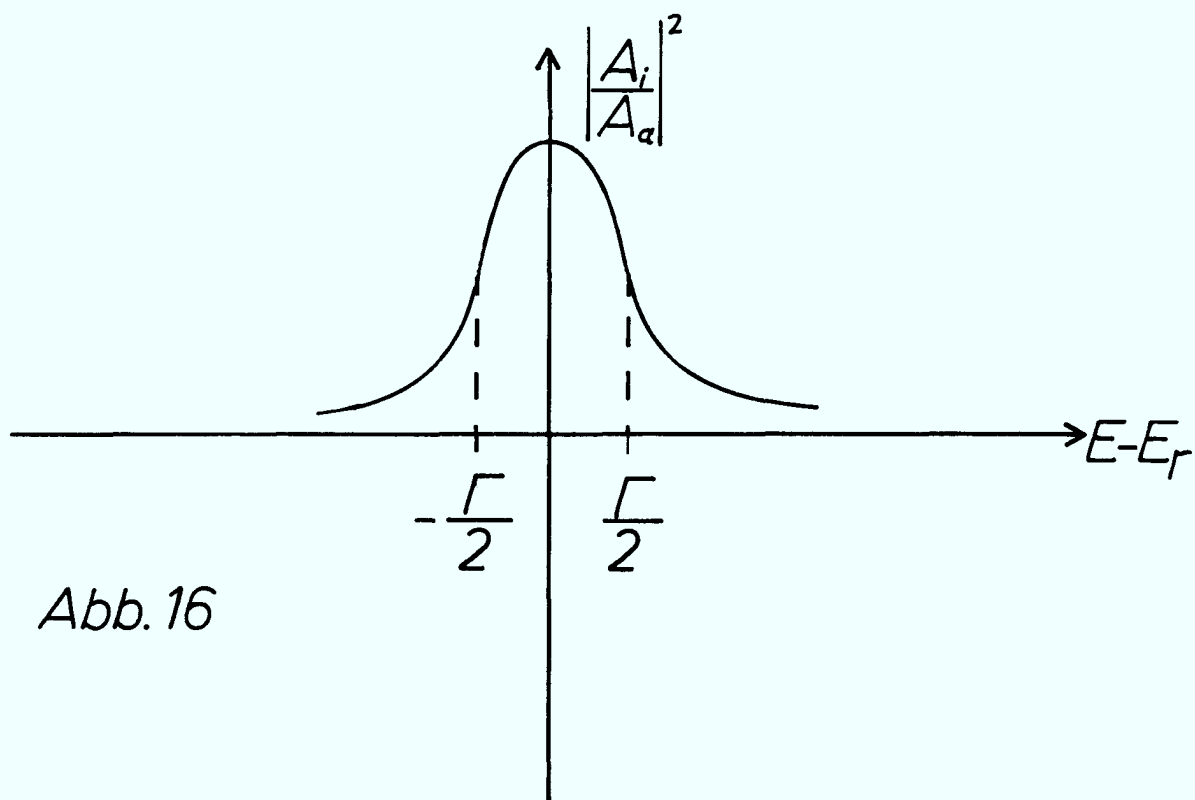
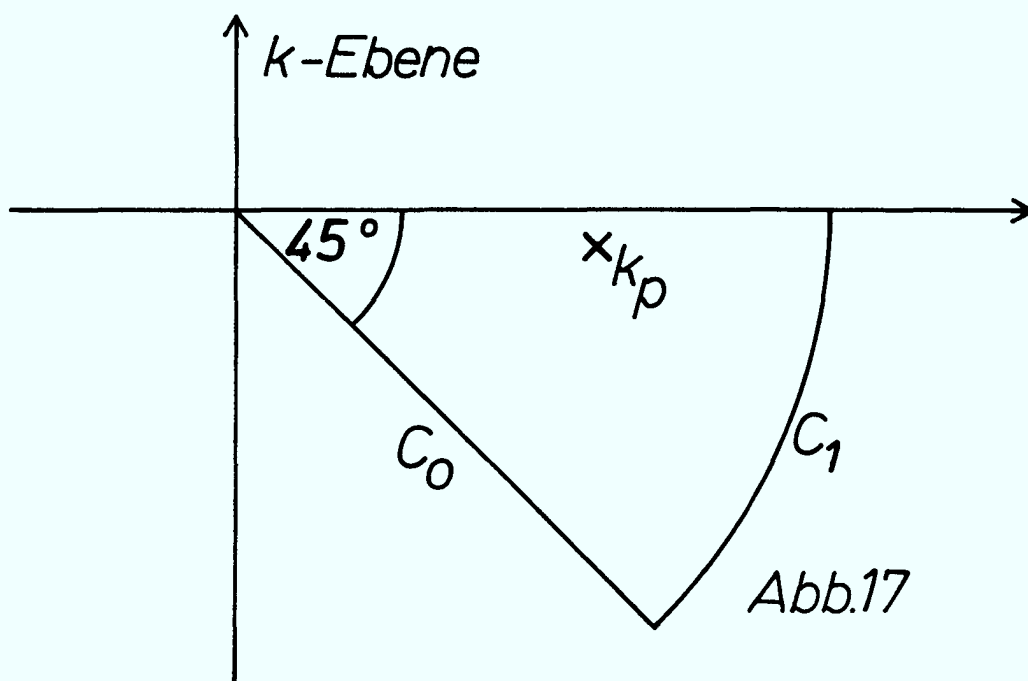


Abb. 16



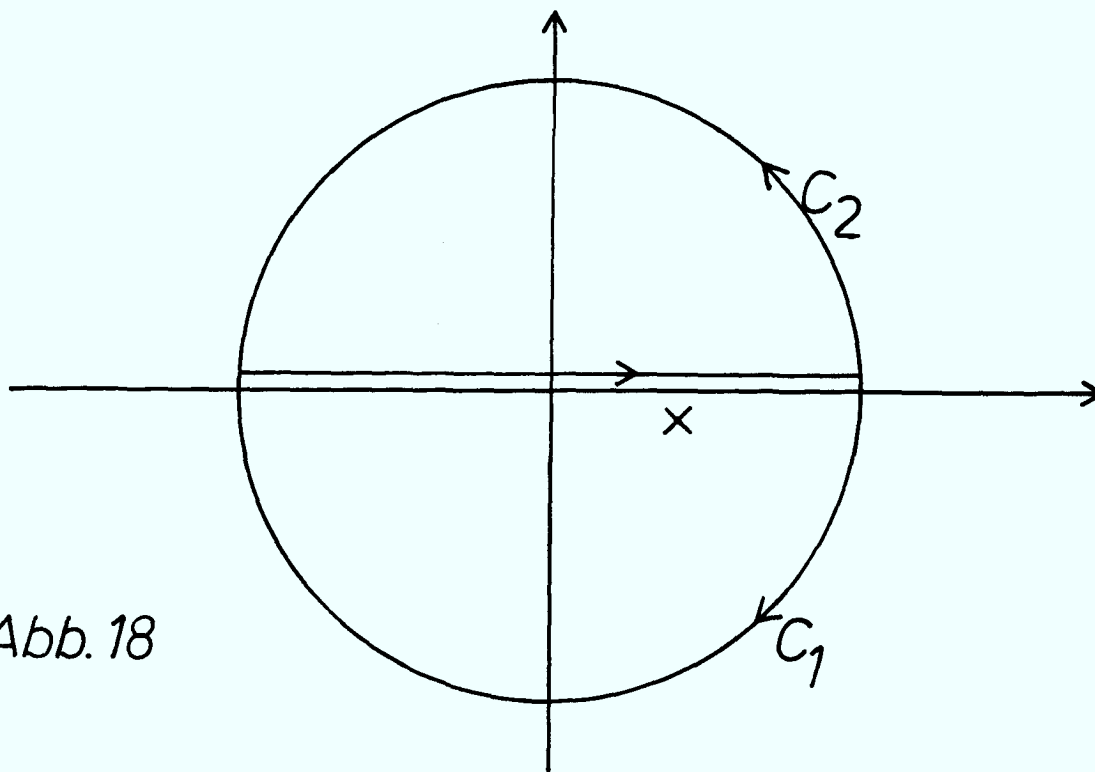


Abb. 18

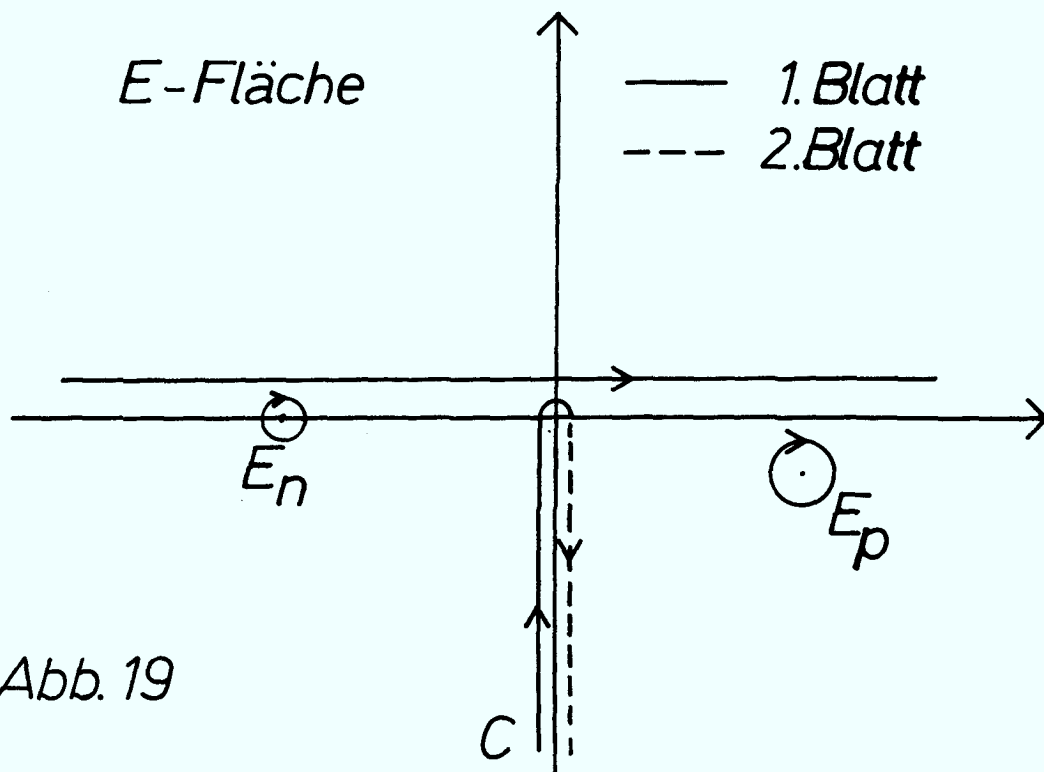


Abb. 19

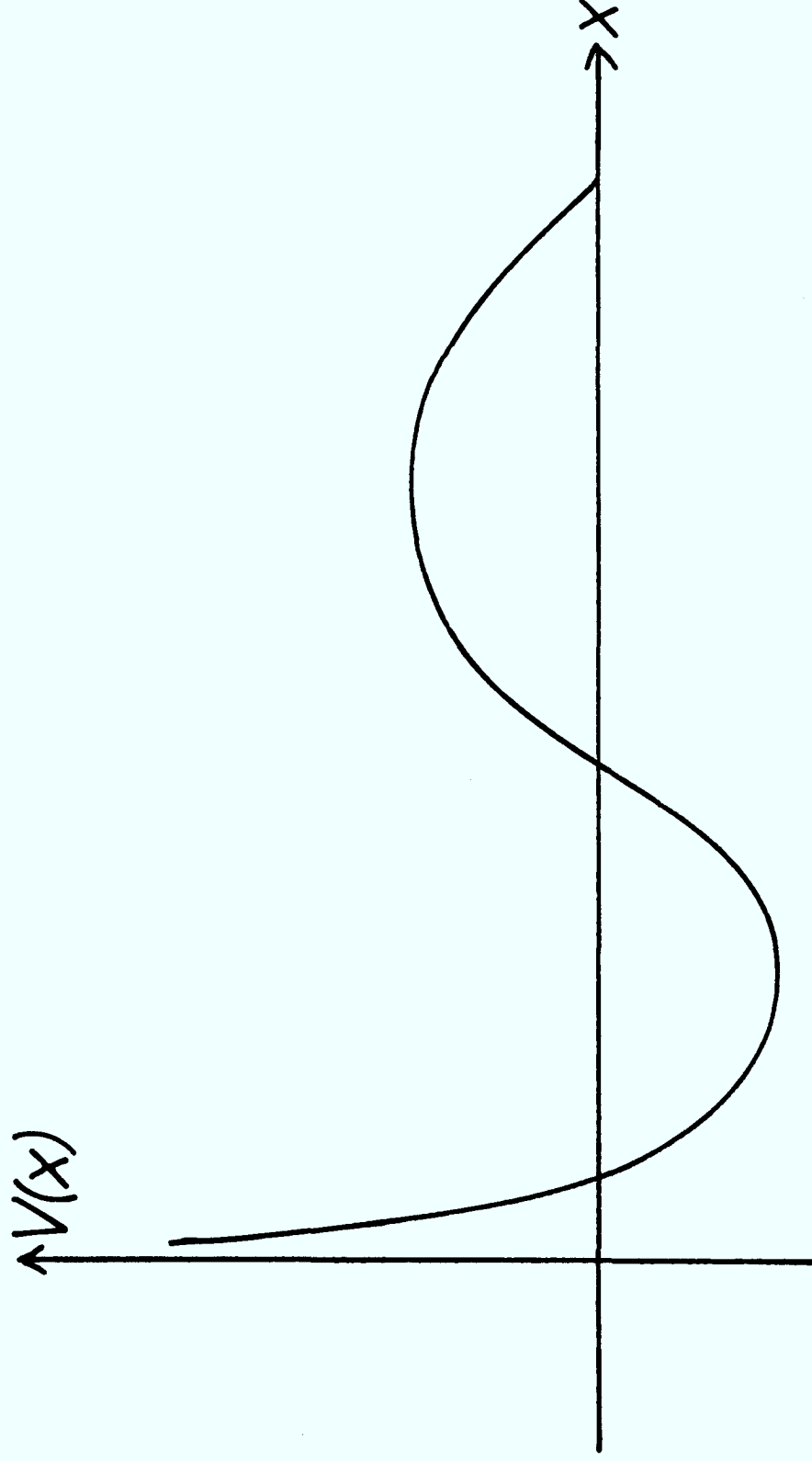


Abb.20

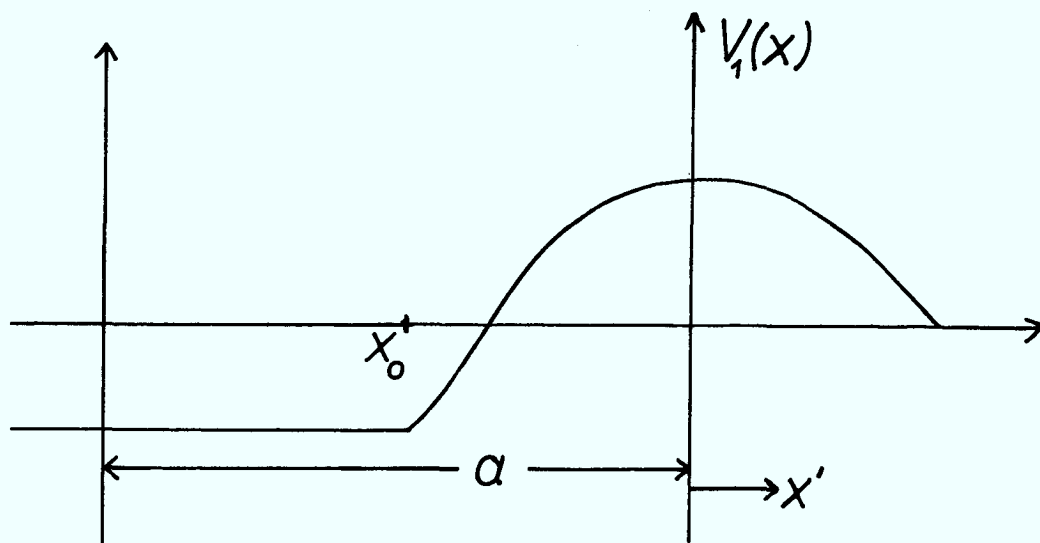


Abb.21a

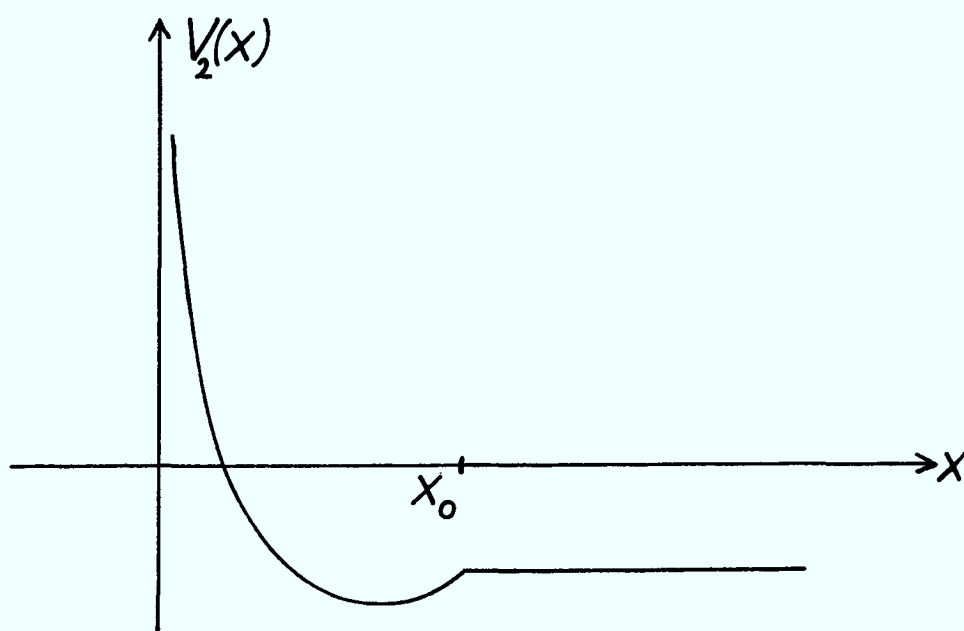


Abb.21b

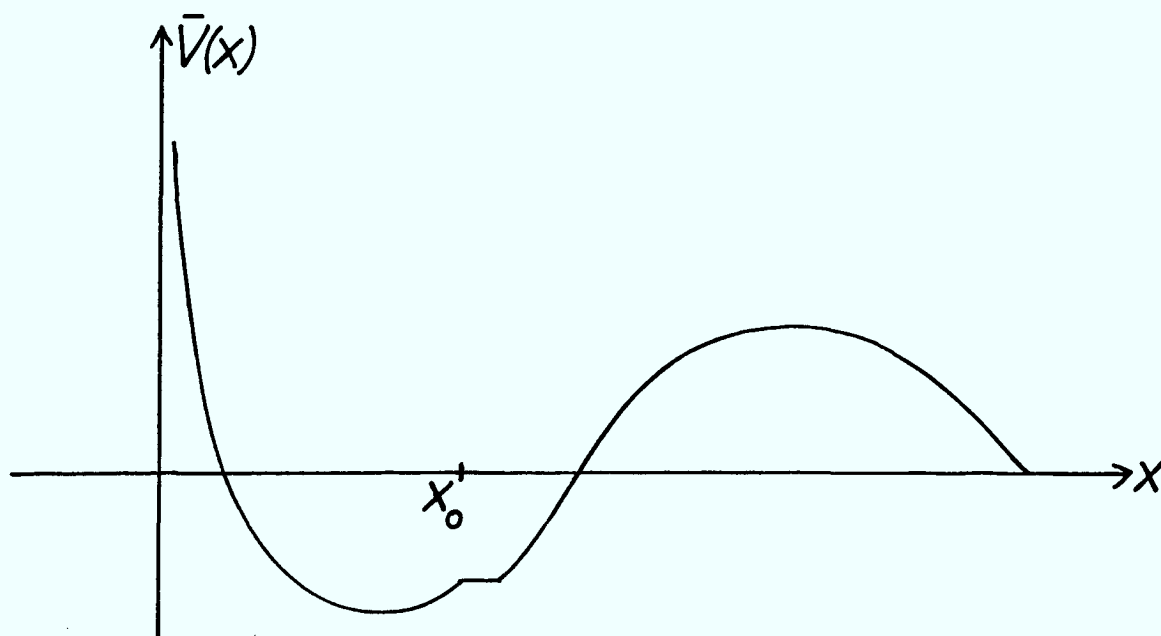


Abb.21c

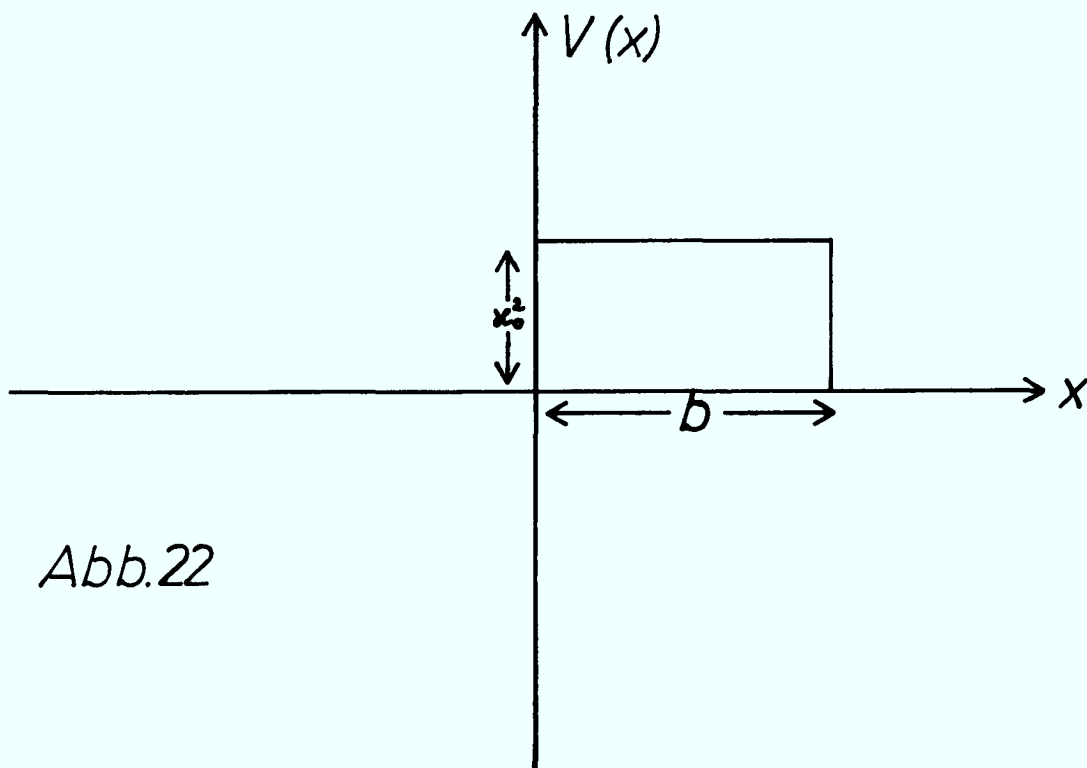


Abb.22

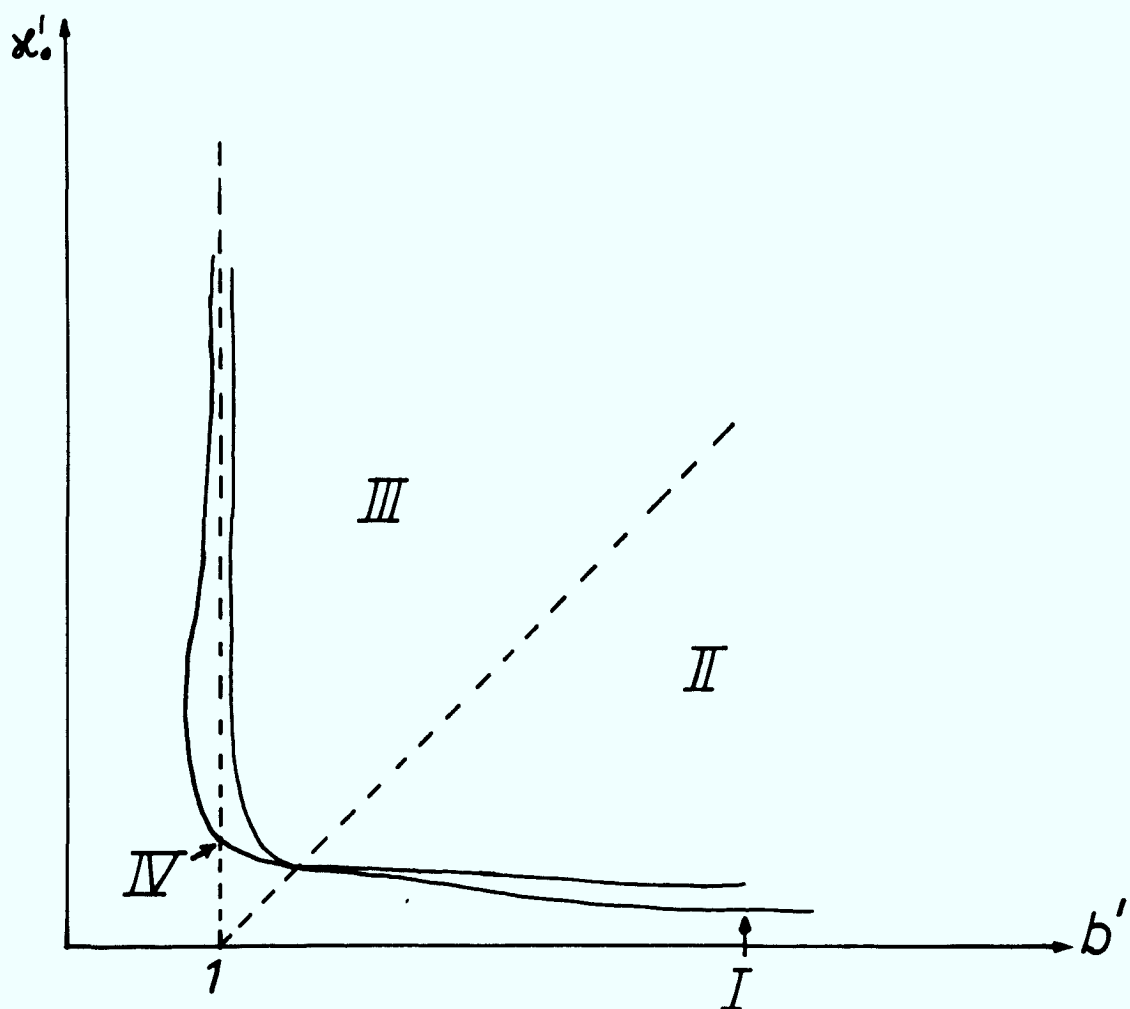


Abb.23

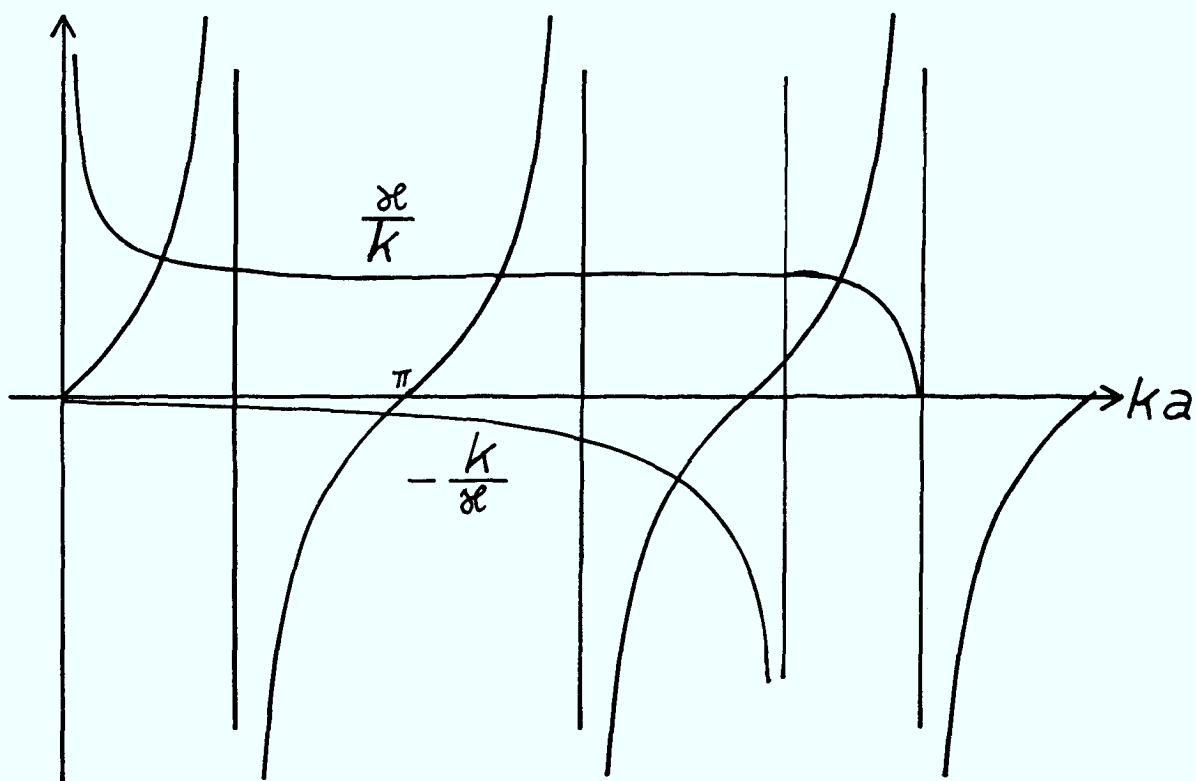


Abb.24

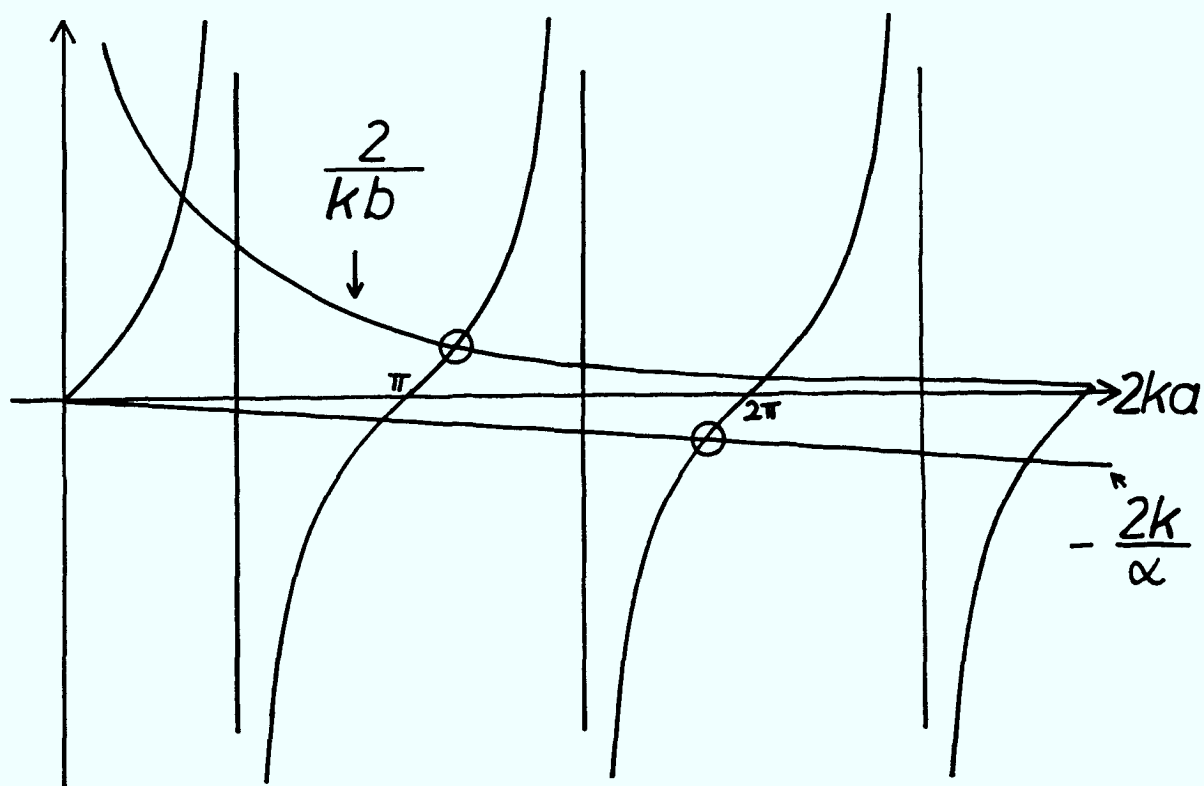


Abb.25

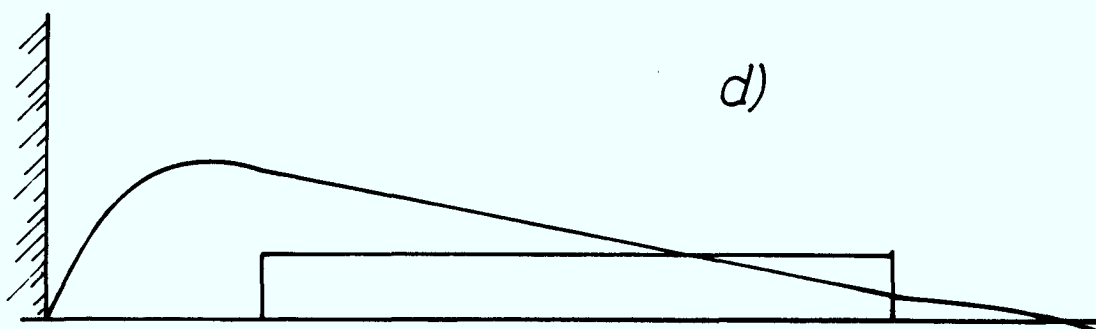
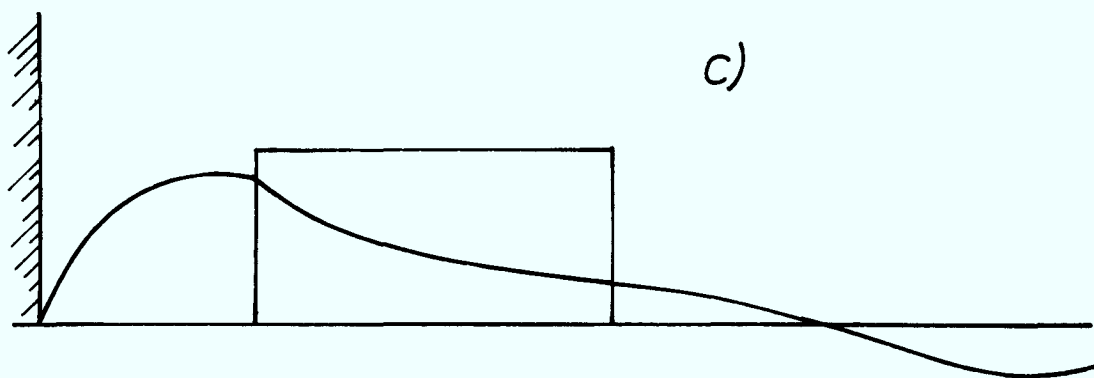
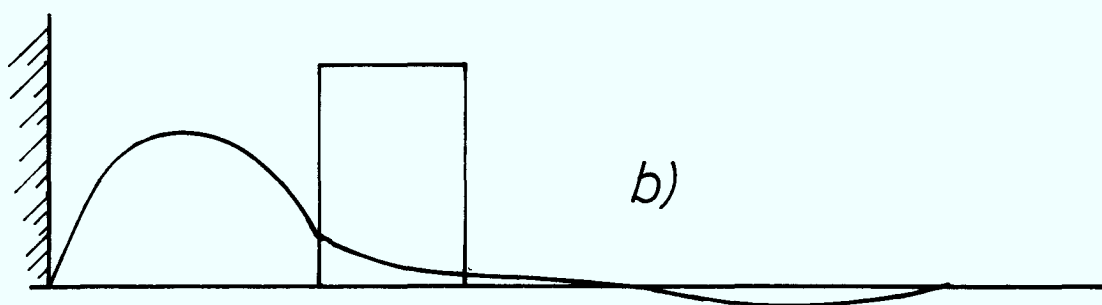
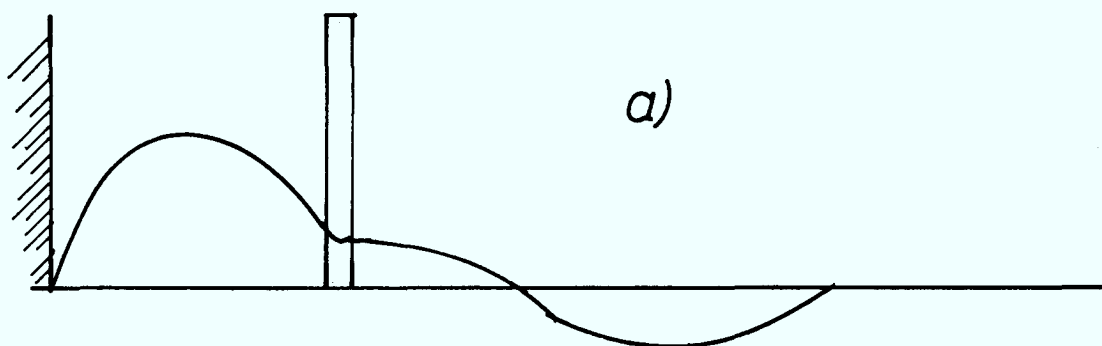
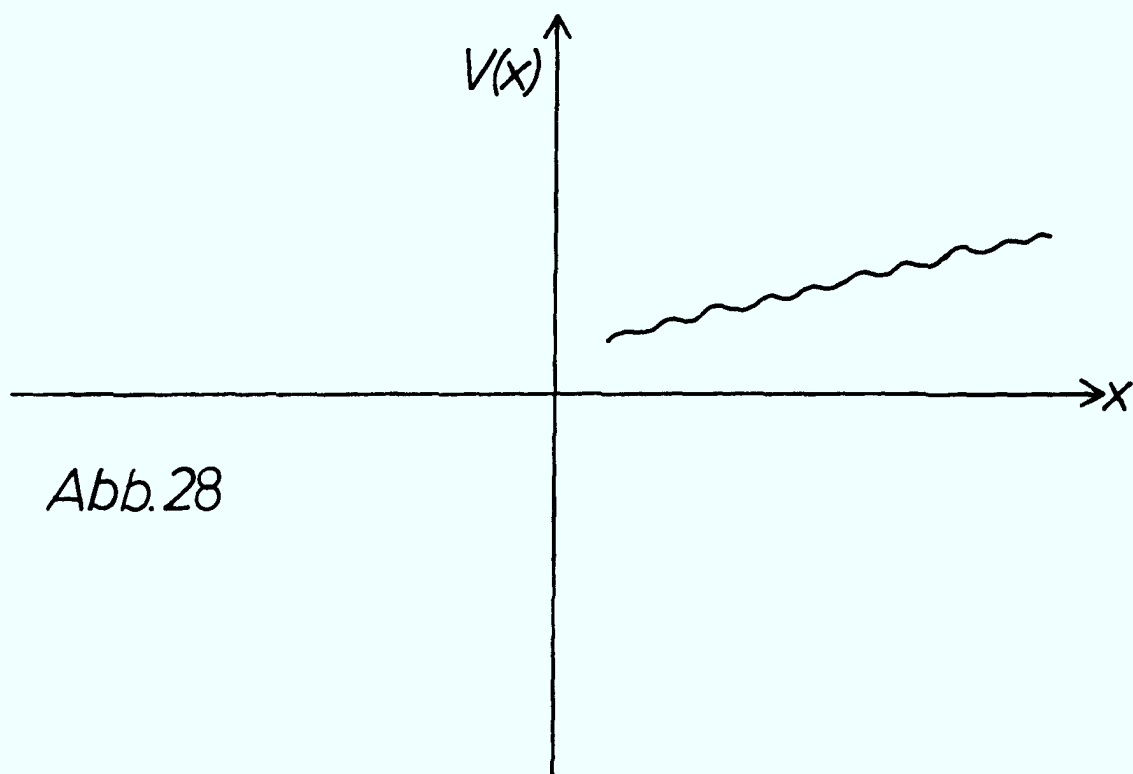
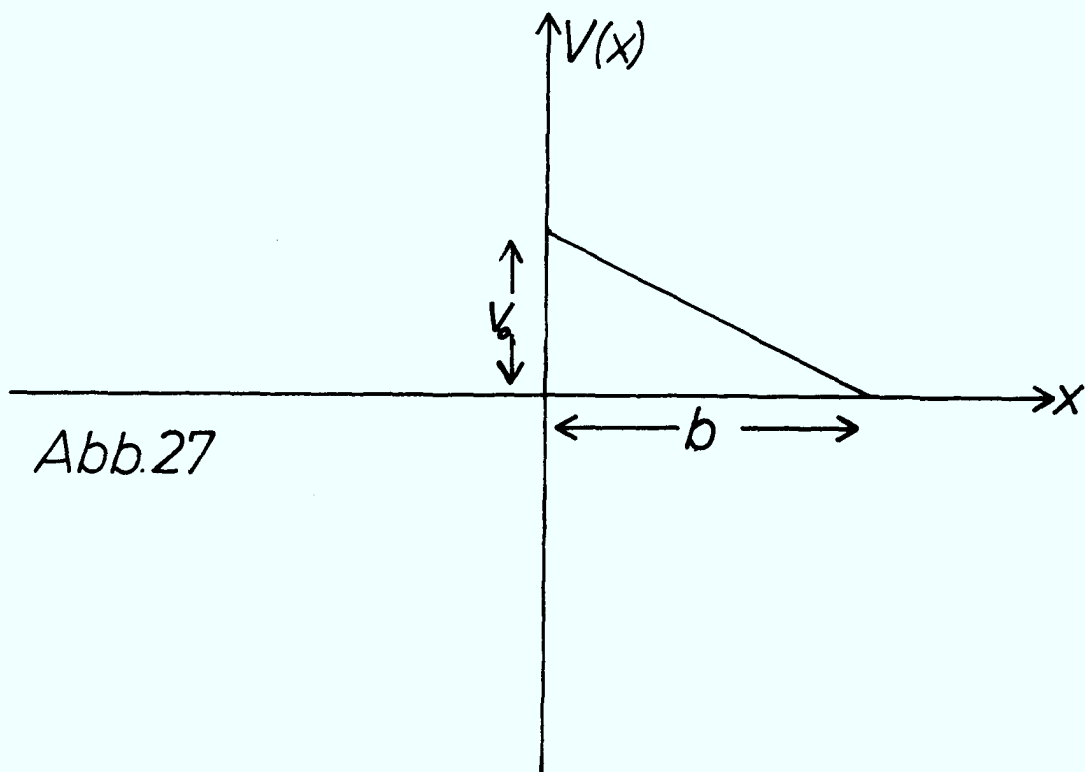


Abb.26



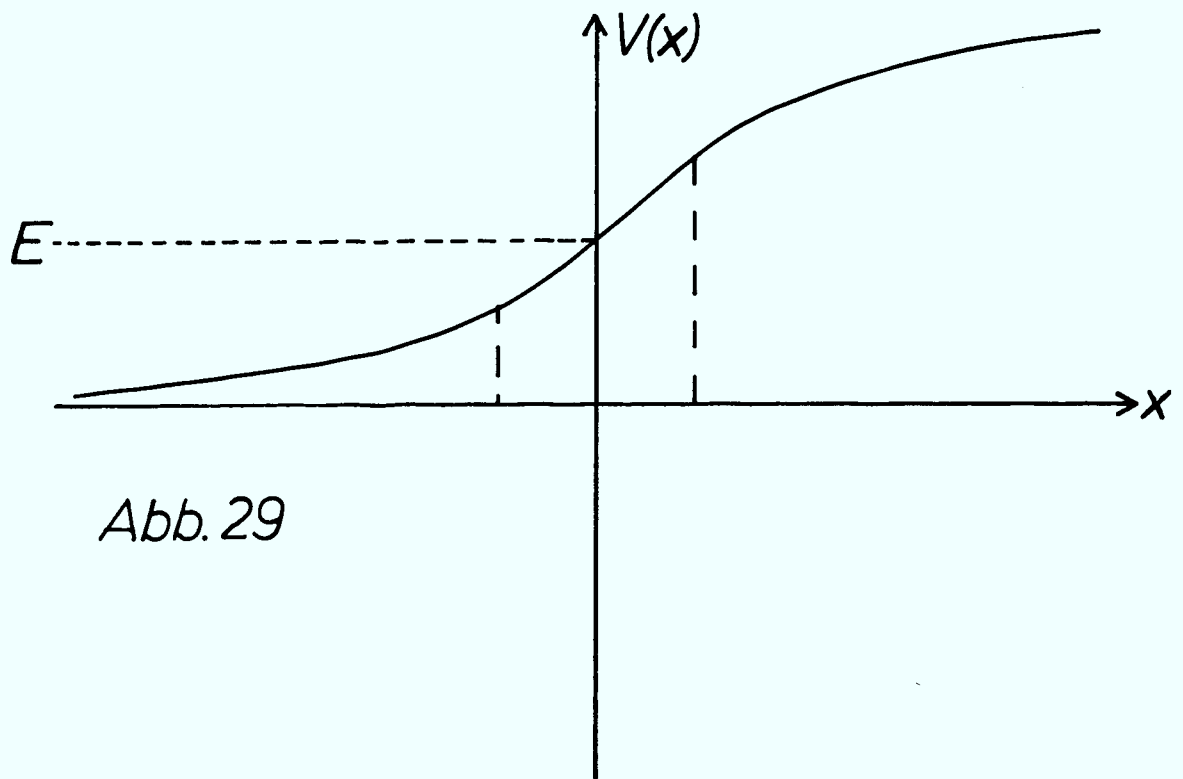


Abb. 29

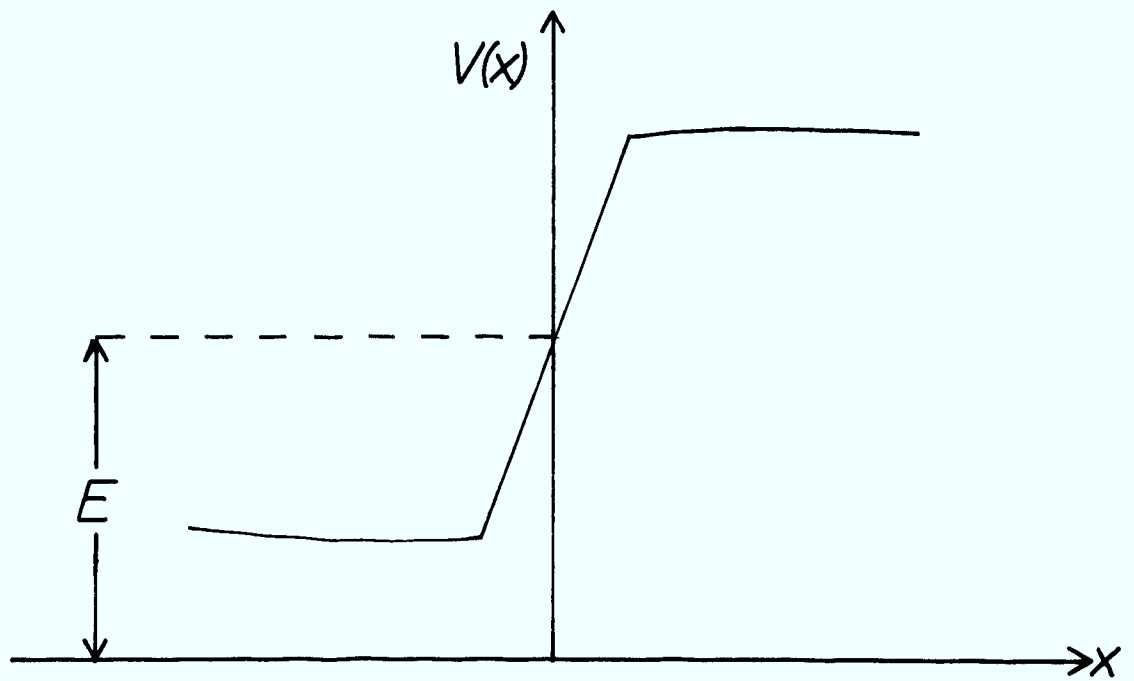


Abb. 30

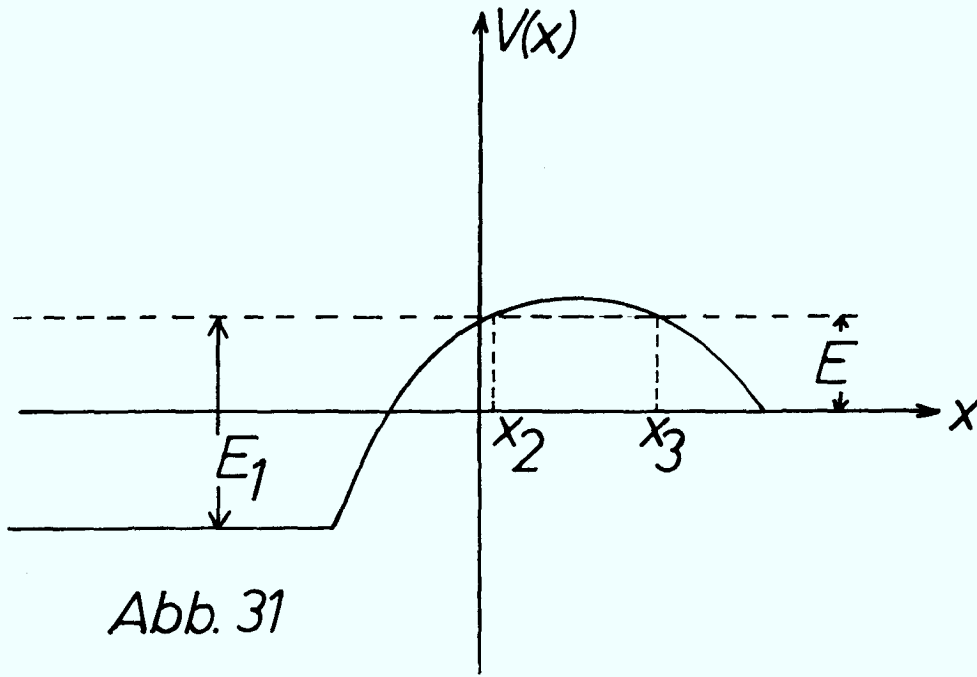


Abb. 31

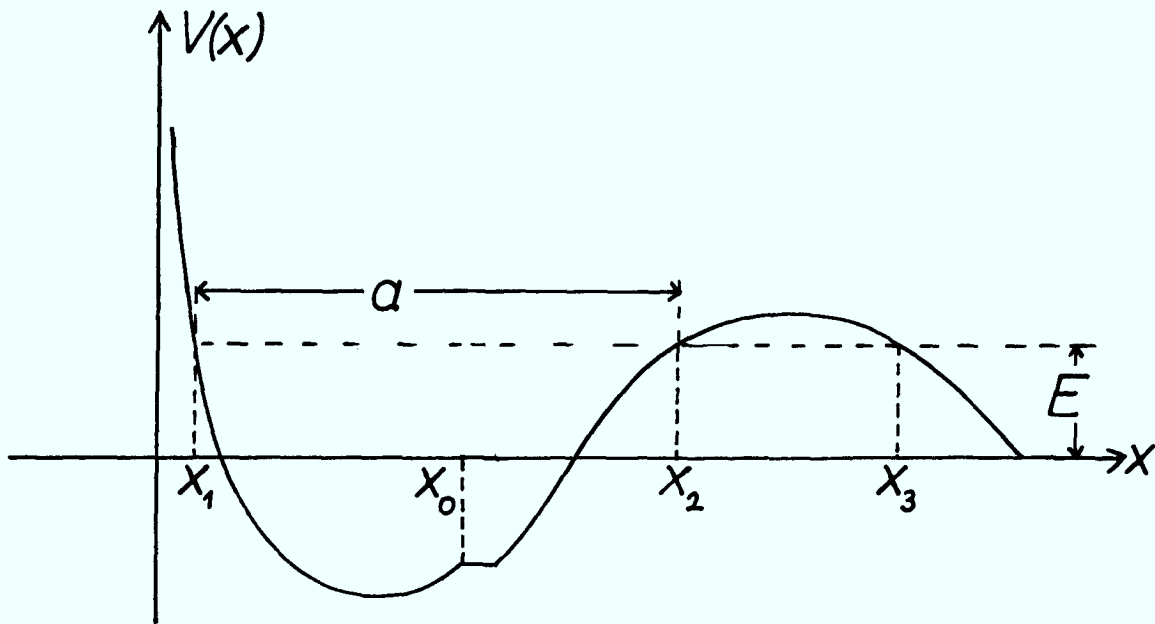


Abb. 32

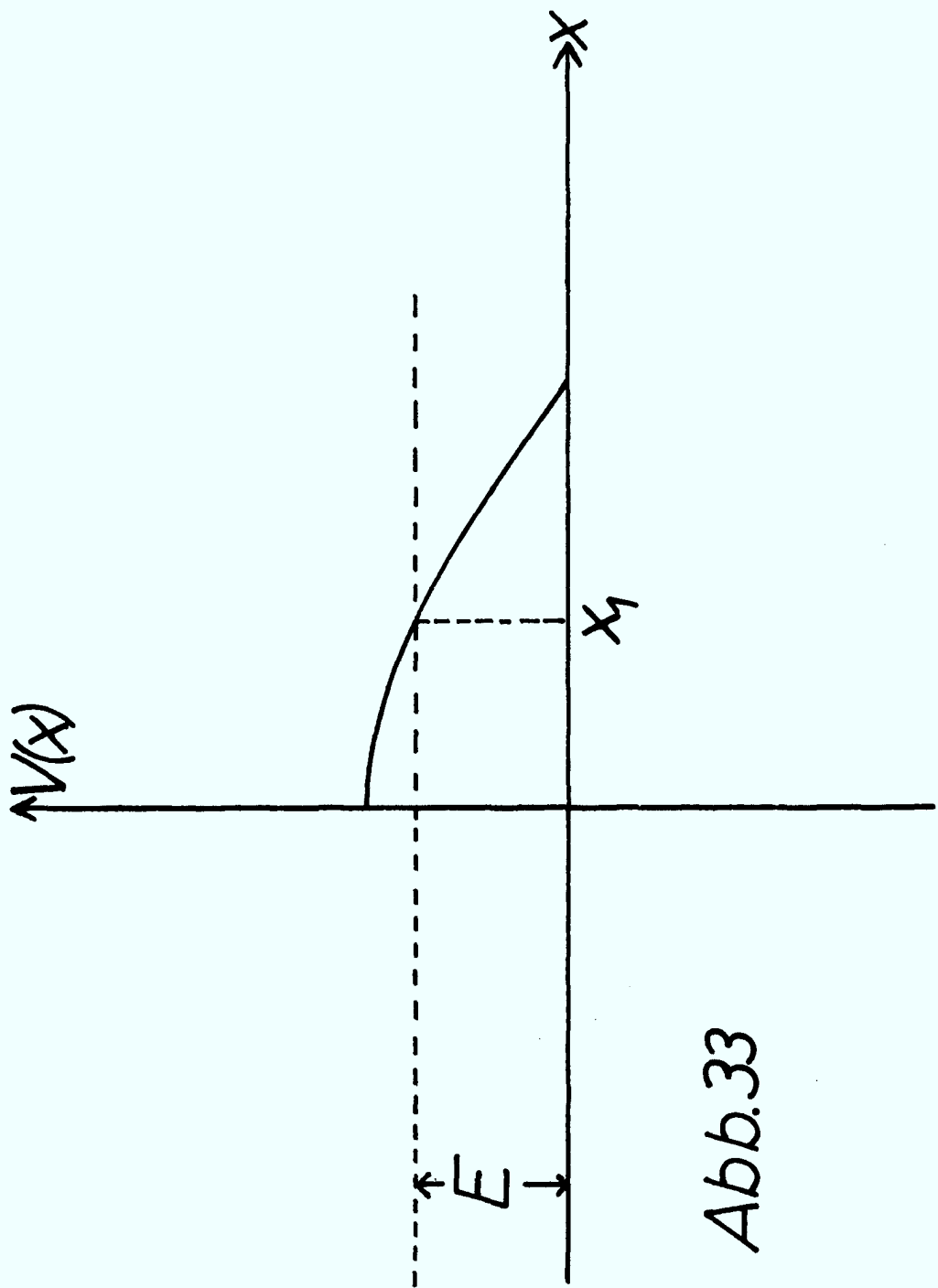


Abb.33

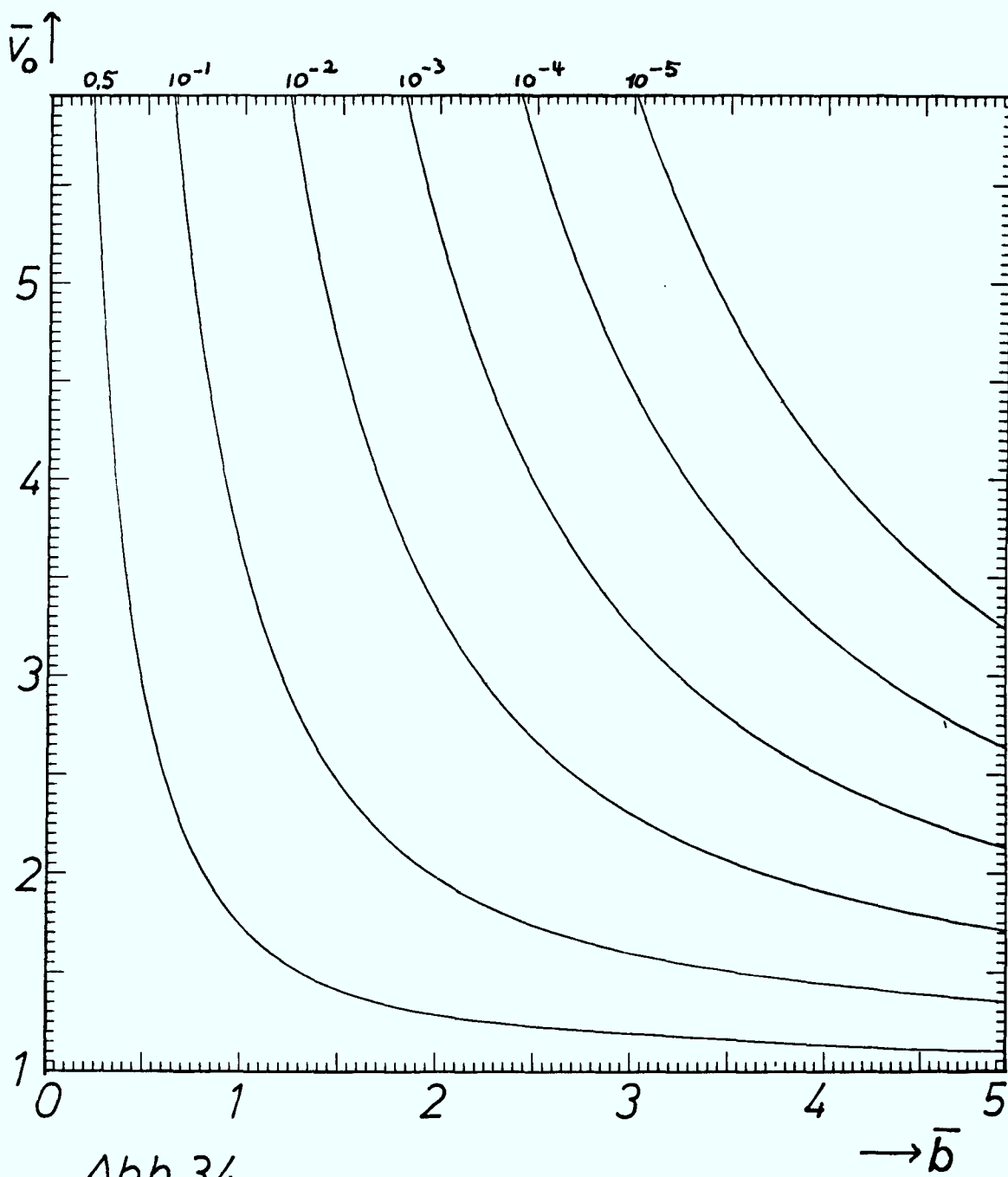


Abb. 34

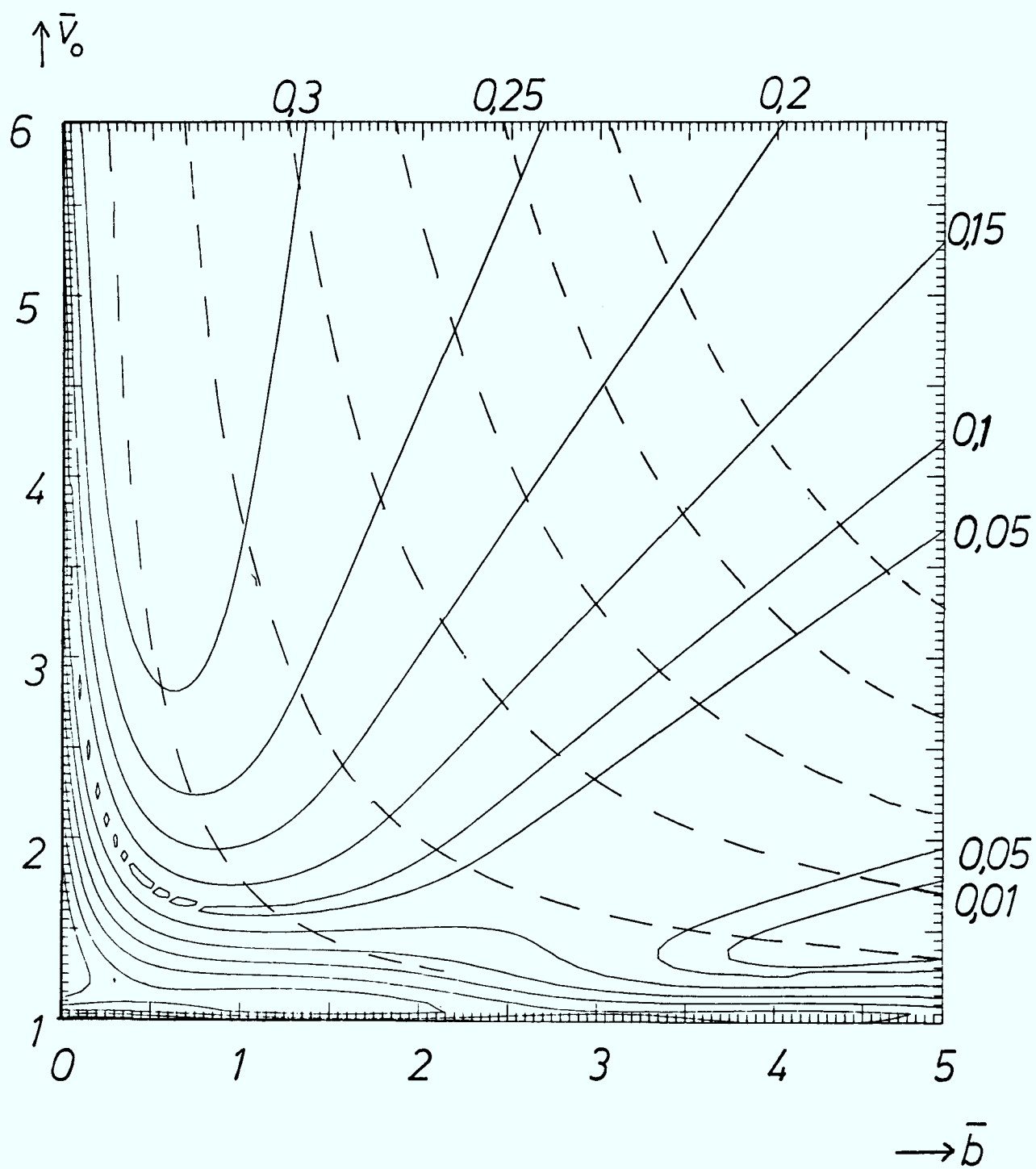


Abb. 35

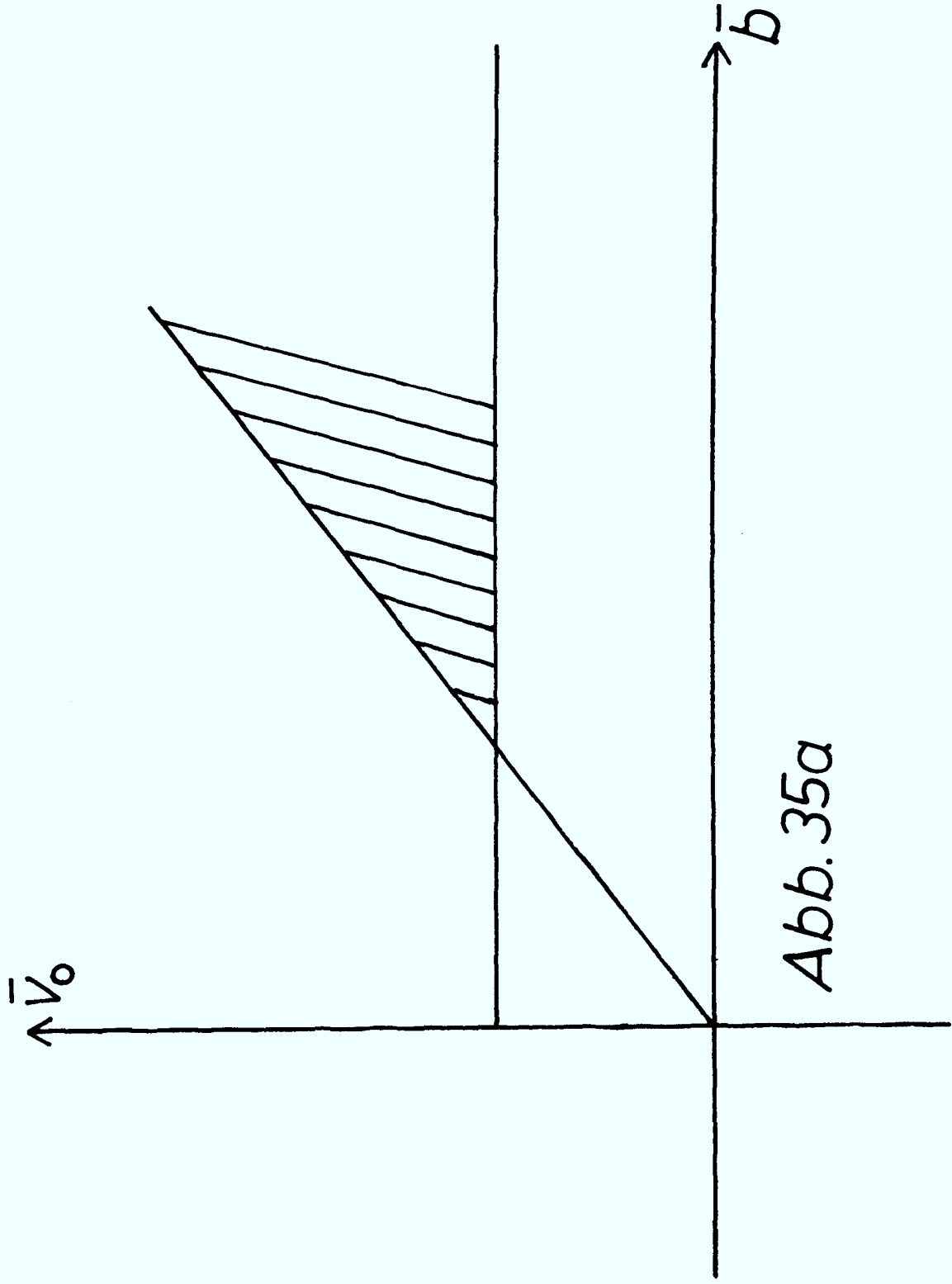
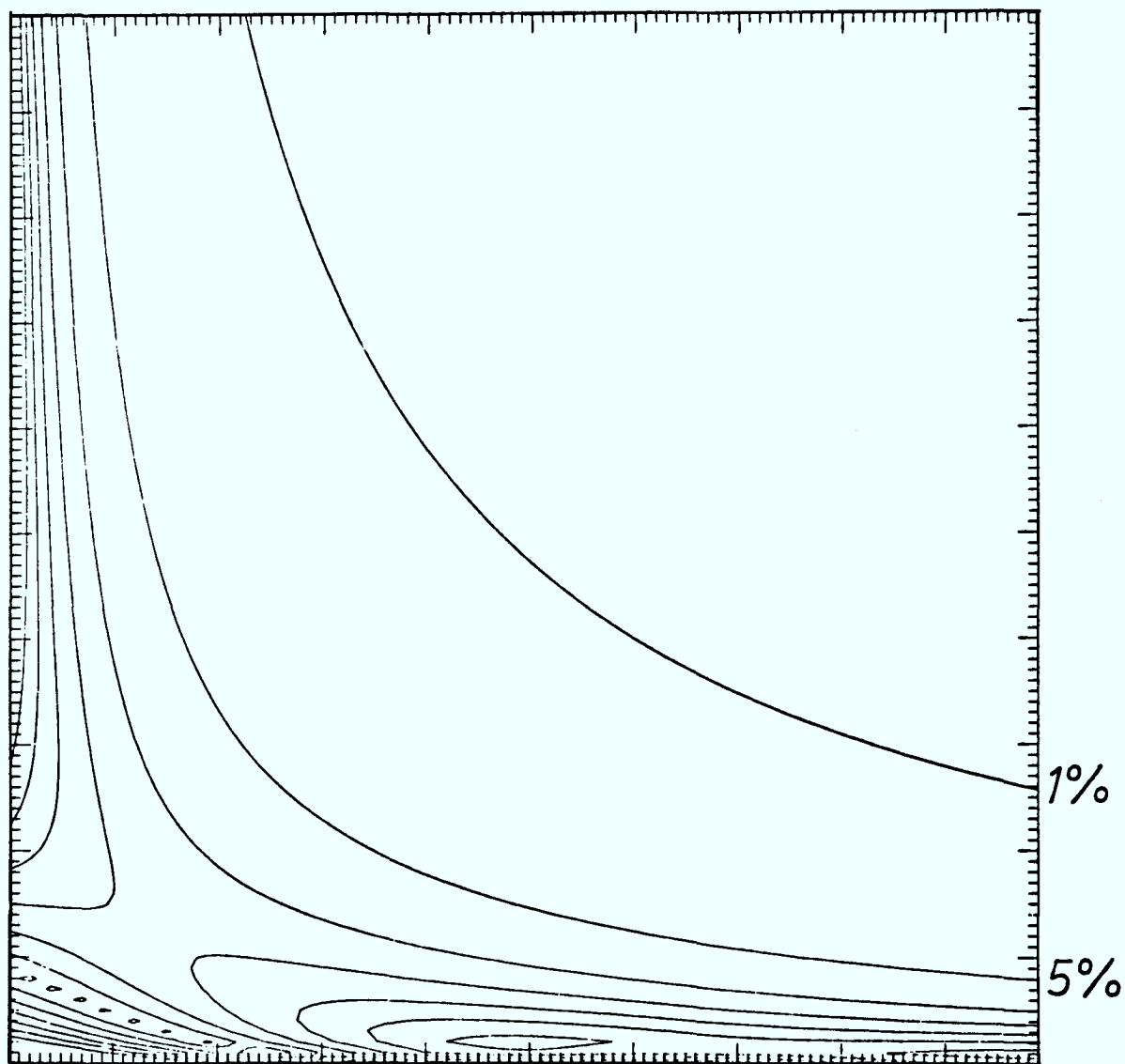


Abb. 35a

$\uparrow \bar{v}_0$



$\longrightarrow \bar{b}$

Abb.36

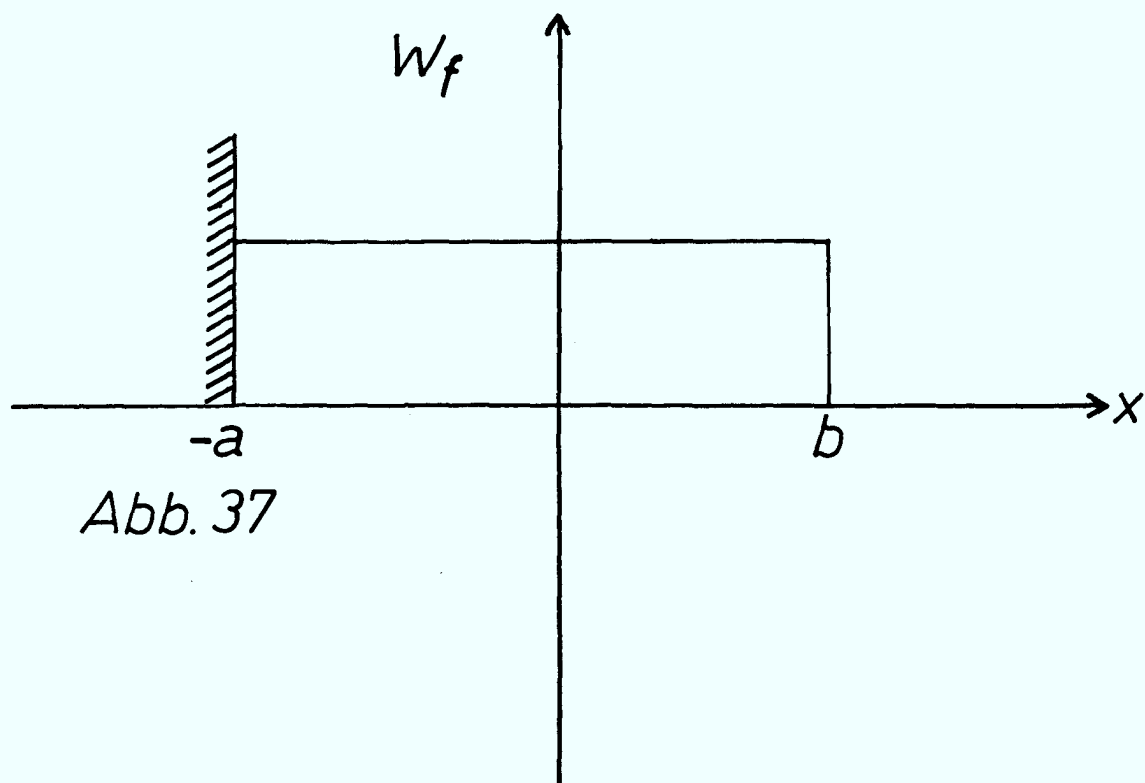
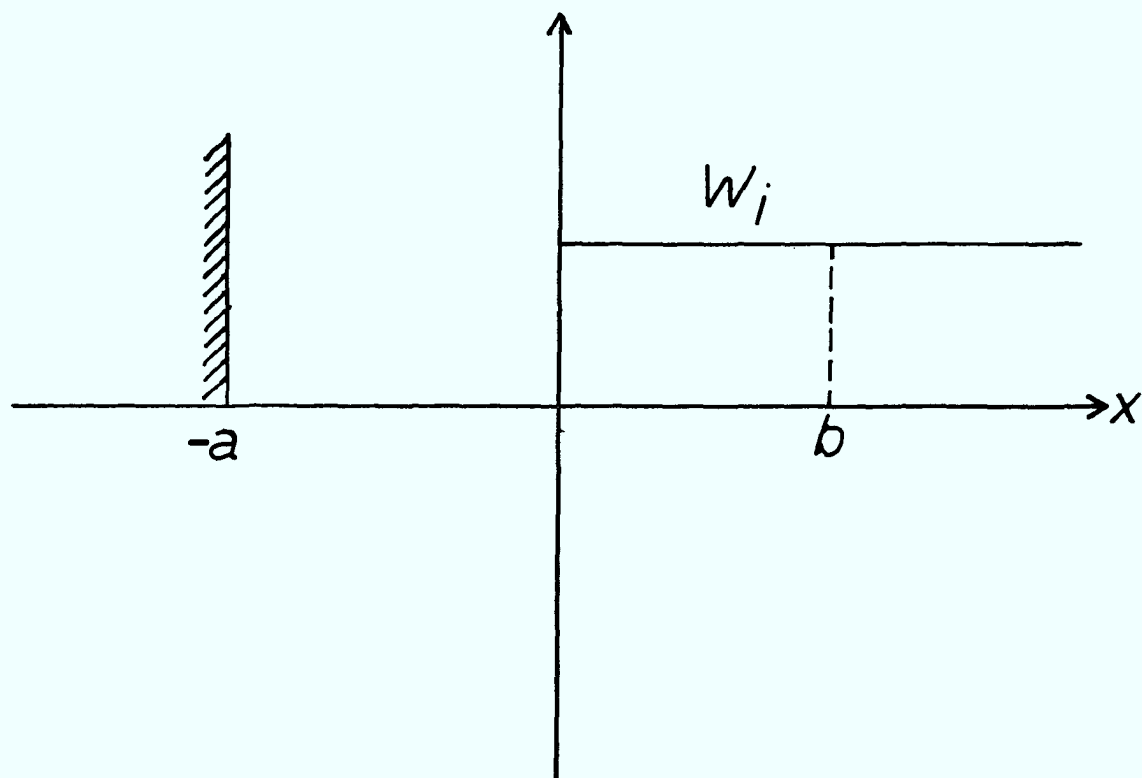


Abb. 37