

Technische Universität München
Institut für Physik
Theoretische Physik T30

Quantenreflexion bei gekoppelten Kanälen

Carlo Gabriel Meister

Vollständiger Abdruck der von der
Fakultät für Physik der Technischen Universität München
zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Naturwissenschaften

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr. F. von Feilitzsch

Prüfer der Dissertation:

1. Univ.-Prof. Dr. H. Friedrich
2. Univ.-Prof. Dr. M. Kleber

Die Dissertation wurde am 20.05.2003 bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die Fakultät für Physik am 23.06.2003 angenommen.

in memoria di mia Madre

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Theoretische Grundlagen	5
1.1 Die WKB-Näherung	5
1.1.1 Die WKB-Wellenfunktion	5
1.1.2 Die Badlandsfunktion	7
1.2 Gekoppelte Kanalgleichungen - Coupled Channel Equations	8
1.3 Quantenreflexion	11
1.3.1 Quantenreflexion in einem Einkanalproblem	11
1.3.2 Niedrigenergieverhalten im Einkanalproblem	12
1.3.3 Hochenergieverhalten im Einkanalproblem	14
1.4 Nichtadiabatische Übergänge	16
1.4.1 Das Landau-Zener-Modell	16
1.4.2 Die Zhu-Nakamura-Theorie	18
2 Allgemeine Eigenschaften von Zweikanalproblemen	21
3 Gekoppelte Stufenpotentiale	25
3.1 Allgemeine Betrachtungen	26
3.2 Ein offener Reflexionskanal, $k^2 < \varepsilon_2$	30
3.3 Zwei offene Reflexionskanäle, $k^2 \geq \varepsilon_2$	33
3.4 Entartete Reflexionskanäle	39
4 Gekoppelte weiche Potentiale	43
4.1 Woods-Saxon-Potentiale	43
4.2 Evaneszente Wellen	48
5 Nichtadiabatische Übergänge	57
5.1 Woods-Saxon-Potentiale	57

5.2 Homogene Potentiale	63
Zusammenfassung	69
Danksagung	77

Abbildungsverzeichnis

3.1	Schematische Illustration der gekoppelten Stufenpotentiale. Die diabatischen Kanäle mit konstanter potentieller Energie $E_1 = 0$ und $E_2 = \hbar^2 \varepsilon_2 / (2m)$ sind für $x > 0$ in dieser Region entkoppelt. Für $x < 0$ ist die diabatische Potentialmatrix $V_{ij} = -\hbar^2 v_{ij} / (2m)$, und die diagonalisierten diabatischen Potentiale sind $W_{ii} = -\hbar^2 w_{ii} / (2m)$. Aus [30].	26
3.2	Die Reflektivität $ R $ als Funktion von k für homogene Potentialschwänze $V \sim -\hbar^2 (\beta_\alpha)^{\alpha-2} / (2mx^\alpha)$ mit $\alpha = 4$ und $\alpha = 6$ und für ein Stufenpotential der Tiefe $\hbar^2 v_0 / (2m)$. Die Potentialparameter der drei Potentiale wurden so gewählt, daß der Längenparameter $b = 1/\sqrt{v_0} = \beta_4 = 0.4779\beta_6$, der das Schwellenverhalten (1.31) bestimmt, gleich 1 in allen Fällen ist. Nach [30].	27
3.3	Der Längenparameter b aus Gleichung (3.19), der das schwellennahe Verhalten der Reflektivität nach Gleichung (3.18) bestimmt, als Funktion der Kopplungsstärke v_{12} für den Wert $v_{11} = 4.5$. Die gestrichelte Linie entspricht $v_{22} = 2.0$ und die durchgezogene Linie $v_{22} = 6.0$. Die Schwelle für inelastische Reflexion ist $\varepsilon_2 = 1.0$. Aus [30].	32
3.4	Reflexionswahrscheinlichkeit $ R_{11} ^2$ als Funktion der Kopplungsstärke v_{12} für $k^2 = 0.3$, $\varepsilon_2 = 1$, $v_{11} = 4.5$ und $v_{22} = 2$ (gestrichelte Linie) und $v_{22} = 6$ (durchgezogene Linie). Aus [30].	34
3.5	Die Reflektivitäten $ R_{11} $ (durchgezogene Linie) und $ R_{12} $ (gestrichelte Linie) als Funktionen der Kopplungsstärke v_{12} für $v_{11} = 4.5$ and $v_{22} = 2.0$ mit der Energie $k^2 = 4.0$. Nach [30]	36
3.6	Die Reflektivitäten $ R_{11} $ im elastischen Kanal als Funktion der Wellenzahl k für verschiedene Werte der Kopplungsstärke v_{12} . Die Tiefen der diagonalen (diabatischen) Potentiale sind $v_{11} = 4.5$, $v_{22} = 2.0$ und die Schwelle für die inelastische Reflexion ist $\varepsilon_2 = 1.0$. Aus [30]. . . .	38

- 3.7 Die Reflexionswahrscheinlichkeiten $P_1^r = |R_{11}|^2$ und $P_2^r = (k_2/k)|R_{12}|^2$ (a) und die Gesamtreflexionswahrscheinlichkeit $P_1^r + P_2^r$ (b) als Funktionen der Wellenzahl k des einlaufenden Teilchens für $v_{11} = 4.5$, $v_{22} = 2.0$, $v_{12} = 5.0$ und $\varepsilon_2 = 1$. Die gestrichelte Linie in Abbildung (b) zeigt zum Vergleich die Reflexionswahrscheinlichkeit für eine einzelne ungekoppelte Stufe der Tiefe $v_{11} = 4.5$. Nach [30]. 42
- 4.1 Die Reflektivitäten eines Stufenpotentials (1.35) und von Woods-Saxon-Potentials (4.3) mit verschiedenen Diffusitäten $1/a$ als Funktion der Wellenzahl k für $v_0 = 4.5$ 45
- 4.2 Die Längenparameter b , die das Niedrigenergieverhalten der jeweiligen Reflektivitäten bestimmen, eines gekoppelten Stufenpotentials (3.1) und von Woods-Saxon-Potentials (4.1) mit verschiedenen Diffusitäten $1/a$ als Funktion der Kopplungsstärke $v_{12} = \tilde{v}_{12}$ für $v_{11} = \tilde{v}_{11} = 4.5$, $v_{22} = \tilde{v}_{22} + \varepsilon_2 = 2.0$ und $\varepsilon_2 = 1.0$ 46
- 4.3 Die Reflektivitäten R_{11} eines gekoppelten Stufenpotentials (3.1) und von Woods-Saxon-Potentials (4.1) mit verschiedenen Diffusitäten $1/a$ als Funktion der Wellenzahl k für $v_{11} = \tilde{v}_{11} = 4.5$, $v_{22} = \tilde{v}_{22} + \varepsilon_2 = 2.0$, $v_{12} = \tilde{v}_{12} = 4.0$ und $\varepsilon_2 = 1.0$ 47
- 4.4 Schematische Illustration des Brechungsgesetzes (4.7). n_1 und n_2 sind die Brechungsindizes der jeweiligen Medien, α_1 ist der Einfallswinkel und α_2 der Brechungswinkel des Lichtstrahls. 48
- 4.5 Schematische Illustration der Totalreflexion. n_1 und n_2 sind die Brechungsindizes der jeweiligen Medien, α_1 ist der Einfallswinkel und α_2 der Brechungswinkel des Lichtstrahls. Bei der Totalreflexion gilt: $\alpha_1 = \alpha_2 > \alpha_G$ 49
- 4.6 Transmissionskoeffizienten $|T_{11}|$ und $|T_{12}|$ als Funktion der Wellenzahl k für die Potentialmatrix (4.21). 54
- 4.7 Die Reflektivität $|R_{11}|$ als Funktion der Wellenzahl k für die Potentialmatrix (4.21). Die gestrichelte Linie ist das Ergebnis für den Fall, daß man die optischen Potentiale in den diagonalen Einträgen vernachlässigt. 55
- 5.1 Illustration der Woods-Saxon-Potentiale (5.1) und (5.2) und des Kopplungspotentials (5.3). Die gepunktete Linie repräsentiert die Badlandsfunktion (1.12) für $k = 0.2$. Die Parameter sind $v_{11} = 5.5$, $v_{22} = 26$, $\varepsilon_2 = 3$, $a_{11} = a_{22} = a_{12} = 1$ und $v_{12} = 0.5$. Nach [31]. 58

5.2	Die numerisch bestimmte Transmissionswahrscheinlichkeit $P_{1 \rightarrow 1'}$ für verschiedene Werte von a_{12} als eine Funktion der Wellenzahl k . Die Parameter sind $v_{11} = 5.5$, $v_{22} = 26$, $\epsilon_2 = 3$, $a_{11} = a_{22} = 1$ und $v_{12} = 0.01$. Aus [31].	59
5.3	Vergleich zwischen der quantenmechanisch bestimmten Transmissionswahrscheinlichkeit $P_{1 \rightarrow 1'}$ (durchgezogene Linie) und der Landau-Zener-Formel (5.4) (gestrichelte Linie) als Funktionen der Wellenzahl k . Die Parameter sind $v_{11} = 5.5$, $v_{22} = 26$, $\epsilon_2 = 3$, $a_{11} = a_{22} = 1$, $a_{12} = 0.05$ und $v_{12} = 0.01$. Aus [31].	60
5.4	Transmissionswahrscheinlichkeit P_u als Funktionen der Wellenzahl k für ein ungekoppeltes Woods-Saxon-Potential mit den Parametern $v_{11} = 5.5$ und $a_{11} = 1$. Aus [31].	61
5.5	Vergleich der Reflexionswahrscheinlichkeit eines gekoppelten Woods-Saxon-Potentials (durchgezogene Linie) und eines einzelnen Woods-Saxon-Potentials (gestrichelte Linie) das $V_{11}(x)$ (5.1) entspricht. Die Parameter sind $v_{11} = 5.5$, $v_{22} = 26$, $\epsilon_2 = 3$, $a_{11} = a_{22} = 1$, $a_{12} = 0.05$ und $v_{12} = 0.01$. Nach [31].	62
5.6	Vergleich zwischen der quantenmechanisch bestimmten Transmissionswahrscheinlichkeit $P_{1 \rightarrow 1'}$ (durchgezogene Linie) und der modifizierten Landau-Zener-Formel (5.5) (gestrichelte Linie) als Funktionen der Wellenzahl k . Die Parameter sind $v_{11} = 5.5$, $v_{22} = 26$, $\epsilon_2 = 3$, $a_{11} = a_{22} = 1$, $a_{12} = 0.05$ und $v_{12} = 0.01$. Aus [31].	62
5.7	Illustration der homogenen Potentiale (5.6) und (5.7) und des Kopp- lungspotentials (5.8). Die Parameter sind $C_{11} = 30$, $C_{22} = 40$, $E_0 = 10$, $a_{12} = 10$ und $C_{12} = 5$. Nach [31].	64
5.8	Vergleich zwischen der quantenmechanisch bestimmten Transmissionswahrscheinlichkeit $P_{1 \rightarrow 1'}$ (durchgezogene Linie) und der modifizierten Landau-Zener-Formel (5.5) (gestrichelte Linie) für verschiedene Schwellenaufspaltungen E_0 als Funktionen der Wellenzahl k . C_{22} wurde jeweils so gewählt, daß der Schnittpunkt der diabatischen Potentiale immer bei $x_0 = 1$ liegt. Die Parameter sind $C_{11} = 30$, $a_{12} = 0.05$ und $C_{12} = 0.01$ für alle Abbildungen. Abbildung (a) zeigt die Kurven für $E_0 = 10$, (b) für $E_0 = 30$ und (c) für $E_0 = 300$	65
5.9	Reflektivität $ R $ als Funktionen der Wellenzahl k für ein ungekoppeltes homogenes Potential mit dem Parameter $C_{11} = 30$	66

- 5.10 Vergleich zwischen der quantenmechanisch bestimmten Transmissionswahrscheinlichkeit $P_{1 \rightarrow 1'}$ (durchgezogene Linie), der modifizierten Landau-Zener-Formel (5.5) (gestrichelte Linie), der Formel von Nakamura und Zhu ohne empirische Korrekturen (5.9) (Kreise) und der mit Korrekturen (5.10) (gepunktete und gestrichelte Linie). Die Parameter sind $C_{11} = 30$, $C_{12} = 40$, $a_{12} = 0.05$, $C_{12} = 0.01$ und $E_0 = 10$. 67
- 5.11 Der Faktor β aus Gleichung (5.11), um die modifizierte Landau-Zener-Formel (5.5) an die quantenmechanische Rechnung anzupassen. Die Parameter sind $C_{11} = 30$, $C_{12} = 40$, $a_{12} = 0.05$, $C_{12} = 0.01$ und $E_0 = 10$. 67
- 5.12 Vergleich zwischen der quantenmechanisch bestimmten Transmissionswahrscheinlichkeit $P_{1 \rightarrow 1'}$ (durchgezogene Linie) und der modifizierten Landau-Zener-Formel (5.11) (gestrichelte Linie) mit einem Korrekturfaktor $\beta = 1.2124$. Die Parameter sind $C_{11} = 30$, $C_{12} = 40$, $a_{12} = 0.05$, $C_{12} = 0.01$ und $E_0 = 10$ 68

Tabellenverzeichnis

1.1	Die Koeffizienten B_α , die durch Gleichung (1.44) gegeben sind und die im Ausdruck (1.43) für das Hochenergieverhalten von R stehen. Aus [20].	15
4.1	Werte für die Parameter, die für die Rechnungen für metastabiles Helium benutzt wurden. Es gilt dabei die Annahme, daß die σ^+ -Welle E_{+1} viel stärker als die π -Welle E_0 ist.	53

Einleitung

Die Fortschritte, die in den letzten Jahren bei der Entwicklung von Kühlungstechniken gemacht wurden, erlauben es, Experimente mit Atomen bei sehr niedrigen Temperaturen durchzuführen. Streuprozesse von Atomen, Molekülen oder Bose-Einstein-Kondensaten bei niedrigen Energien haben in letzter Zeit viel Aufmerksamkeit auf sich gezogen [47, 56].

Ein Effekt, der bei diesen Temperaturen eine sehr wichtige Rolle spielt, ist die sogenannte Quantenreflexion, die bewirken kann, daß ein Teilchen reflektiert wird, ohne einen klassischen Umkehrpunkt zu erreichen. Quantenreflexion wird z. B. durch die langreichweitigen Anteile der Atom-Atom- oder Atom-Oberflächen-Wechselwirkung hervorgerufen und kann verhindern, daß die Atome nahe genug kommen, um die kurzreichweitigen Kräfte zu spüren. Daher besteht im Falle der Atom-Oberflächen-Wechselwirkungen die Möglichkeit, daß das Teilchen nicht an der Oberfläche haftet („sticking“) oder nicht inelastisch reflektiert wird [6].

Erste Experimente zur Quantenreflexion wurden anhand der Reflexion von Helium- und Wasserstoffatomen an der Oberfläche von superflüssigem Helium [4, 15, 37, 59] durchgeführt. Shimizu [50] benutzte diesen Effekt, um Retardierungseffekte beim Casimir-van-der-Waals-Potential nachzuweisen. Außerdem wurde von Shimizu und Fujita [51] das erste atomoptische Bauelement vorgestellt, das auf dem Prinzip der Quantenreflexion beruht. In mehreren Arbeiten [12, 16, 17, 18, 35] wurde bisher das Niedrigenergieverhalten der Quantenreflexion für eine Vielzahl von Potentialen untersucht. Friedrich et al. [20] haben kürzlich für homogene Potentiale und das Casimir-van-der-Waals-Potential einen Ausdruck für die Quantenreflexion bei hohen Energien hergeleitet.

Bei all diesen Veröffentlichungen wurde zu Grunde gelegt, daß das Teilchen jeweils während des ganzen Prozesses in seinem ursprünglichen Zustand verbleibt. Bei Atom-

Atom- oder Atom-Oberflächen-Wechselwirkungen kann es aber vorkommen, daß das Teilchen in einen anderen Zustand übergeht. Dies wird mit Hilfe der gekoppelten Kanalgleichungen beschrieben, wobei wir in dieser Arbeit Systeme mit nur zwei Zuständen betrachten wollen. Ziel dieser Arbeit soll es sein, zu sehen wie sich die Eigenschaften der Quantenreflexion bei Vorhandensein eines zweiten Kanals verhalten. Unter bestimmten Umständen besteht die Möglichkeit, daß sich die Potentialkurven, die die beiden Zustände des Teilchens beschreiben, kreuzen und es dabei zu einem nichtdiabatischen Übergang kommt. Diese Übergangswahrscheinlichkeit wird sehr häufig mit Hilfe des Landau-Zener-Modells beschrieben. Wir wollen hier untersuchen, welchen Einfluß die Quantenreflexion auf die Übergangswahrscheinlichkeit hat und wie man die Formel von Landau und Zener modifizieren muß, um das richtige Niedrigenergieverhalten zu erhalten.

In Kapitel 1 stellen wir die Grundlagen für die vorliegende Arbeit vor. Da wir für die Bestimmung der Reflexion und Transmission Bereiche benötigen, in denen es unidirektionale Lösungen der Schrödinger-Gleichung gibt, beginnen wir mit der WKB-Näherung, die uns die nötigen Informationen für die Berechnungen der Wahrscheinlichkeiten liefert. In Abschnitt 1.2 führen wir das Konzept der gekoppelten Kanalgleichungen ein und in Abschnitt 1.3 stellen wir die wichtigsten Eigenschaften der Quantenreflexion in Einkanalssystemen vor. Den Abschluß des Grundlagenteils bildet die Beschreibung der nichtdiabatischen Übergänge, wo wir auf das altbekannte Landau-Zener-Modell und die neue Theorie von Zhu und Nakamura eingehen werden.

Das zweite Kapitel soll Aufschluß über allgemeine Eigenschaften von Zweikanalssystemen geben.

Im dritten Abschnitt wollen wir gekoppelte Stufenpotentiale untersuchen, die den Vorteil bieten, daß man für alle Größen analytische Ausdrücke angeben kann. Dabei werden wir, neben dem schwelennahen Bereich, in unseren Betrachtungen auch höhere Energiebereiche berücksichtigen, v.a. dort, wo alle Kanäle offen sind.

Ziel des vierten Kapitels ist es, zu sehen, welche der vorherigen Ergebnisse auch bei stetigen Potentialen gültig sind. Dazu betrachten wir als erstes gekoppelte Woods-Saxon-Potentiale, die im Limes verschwindender Diffusität wiederum in Stufenpotentiale übergehen. Danach richten wir unser Augenmerk auf eine von Marani et al. [28] untersuchte experimentelle Situation. Dabei wurden zwei Zustände eines Atoms über ein optisches Potential, das durch eine evaneszente Welle erzeugt wurde, miteinander gekoppelt. Hier hat dann auch das Kopplungspotential, im Gegensatz zu den vorher untersuchten Systemen, eine andere Reichweite als die diagonalen Potentiale $V_{11}(x)$ und $V_{22}(x)$.

Im letzten Abschnitt zeigen wir anhand von Woods-Saxon- und homogenen Potentialen, wie das Landau-Zener-Modell für niedrige Energien modifiziert werden muß. Außerdem vergleichen wir für die homogenen Potentiale die Theorie von Zhu und Nakamura mit der von Landau und Zener. Wir werden dort auch einen konstanten Faktor β in den Exponenten der Landau-Zener-Formel einführen, der es uns ermöglicht, eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der exakten quantenmechanischen Rechnung und dem Modell zu erhalten.

KAPITEL 1

Theoretische Grundlagen

1.1 Die WKB-Näherung

Um ein mikroskopisches System quantenmechanisch exakt zu beschreiben, benutzt man die von Schrödinger 1926 aufgestellte Wellengleichung:

$$\hat{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) , \quad (1.1)$$

mit dem Hamiltonoperator $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})$.

Aus dieser ist es möglich, die Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ des Teilchens und die Energieeigenwerte E , falls es sich um gebundene Zustände handelt, zu bestimmen. Da man eine komplizierte Eigenwertgleichung zu lösen hat, versucht man oft, die Schrödinger-Gleichung mit Näherungsmethoden zu lösen. Für eindimensionale Systeme benutzt man die semiklassische Näherung von Wentzel [57], Kramers [24] und Brillouin [8], die **WKB**-Methode. Sie liefert eine Verbindung zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik, indem sie das Konzept der Wellenfunktion mit der Bewegung entlang einer Bahn in Verbindung bringt.

1.1.1 Die WKB-Wellenfunktion

Zuerst wollen wir einen genäherten Ausdruck für die Wellenfunktion $\psi(x)$ finden. Dazu schreiben wir nach [19] die Wellenfunktion eines Teilchens der Masse m , das sich in einem Potential $V(x)$ befindet, als

$$\psi(x) = \exp[ig(x)] , \quad (1.2)$$

wobei $g(x)$ eine komplexe Funktion ist. Berücksichtigen wir noch die Aufteilung der klassischen Energie in einen kinetischen und einen potentiellen Anteil

$$E = T + V(x) = \frac{p(x)^2}{2m} + V(x), \quad p(x) = \pm \sqrt{2m[E - V(x)]},$$

so können wir die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (1.1) schreiben als

$$\psi''(x) + \frac{p^2(x)}{\hbar^2} \psi(x) = 0. \quad (1.3)$$

Mit Ansatz (1.2) erhalten wir:

$$(g'(x))^2 = \frac{p^2(x)}{\hbar^2} + ig''(x). \quad (1.4)$$

Somit ergibt sich dann für $g'(x)$ folgende Gleichung durch Entwickeln der Wurzel:

$$\begin{aligned} g'(x) &= \pm \frac{p(x)}{\hbar} \sqrt{1 + i \frac{\hbar^2}{p^2(x)} g''(x)} \\ &= \pm \frac{p(x)}{\hbar} \left\{ 1 \pm i \frac{\hbar^2}{2p^2(x)} g''(x) + O \left[\left(\frac{\hbar^2}{p^2(x)} (g''(x)) \right)^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Die semiklassische Näherung entspricht nun dem Limes $\hbar \rightarrow 0$, da man \hbar als sehr kleine Größe im Vergleich zu $\oint p(x) dx$ betrachtet. Daraus folgt für $g'(x)$ in führender Ordnung in \hbar $g'(x) = \pm p(x)/\hbar$ und $g''(x) = \pm p'(x)/\hbar$. Damit reduziert sich Gleichung (1.5) auf

$$\begin{aligned} g'(x) &= \pm \frac{p(x)}{\hbar} + i \frac{p'(x)}{2p(x)} \\ \Rightarrow g(x) &= \pm \frac{1}{\hbar} \int_{\bar{x}}^x p(x') dx' + \frac{i}{2} \ln p(x) + \text{konst.} \end{aligned} \quad (1.6)$$

Setzt man nun dies in die WKB-Wellenfunktion (1.2) ein, so erhält man:

$$\psi_{WKB}(x) \propto \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[\pm \frac{i}{\hbar} \int_{\bar{x}}^x p(x') dx' \right], \quad (1.7)$$

wobei die untere Integrationsgrenze nur eine konstante Phase in der Wellenfunktion (1.7) bewirkt, die durch die Anfangsbedingungen gegeben ist¹. Das Integral

¹Bei der Reflexion an einem attraktiven Potential, gibt es keinen Wendepunkt und somit auch keinen natürlichen Bezugspunkt, der sich als untere Integrationsgrenze anbietet.

$\int_{\tilde{x}}^x p(x') dx'$ ist die klassische Wirkung S . Für die Anwendbarkeit der WKB-Funktion (1.7) als Lösung der Schrödinger-Gleichung (1.1) wird in der Literatur [12, 34, 50] oft gefordert, daß die lokale de-Broglie-Wellenlänge $\lambda = 2\pi\hbar/|p(x)|$ langsam genug variiert, also

$$\left| \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{p(x)} \right) \right| = \hbar \left| \frac{p'}{p^2} \right| \ll \frac{1}{2\pi} \quad . \quad (1.8)$$

Diese Bedingung reicht in vielen Fällen aus, ist aber i. a. weder hinreichend noch notwendig.

Ein Beispiel dafür, daß die Erfüllung von (1.8) nicht notwendig ist, ist ein Potential, das proportional zu $1/x^4$ ist [20]. Für ein Teilchen mit Energie Null sind die WKB-Wellenfunktionen für alle x -Werte exakte Lösungen der Schrödinger-Gleichung, wohingegen die linke Seite von (1.8) proportional zu x ist und somit für $x \rightarrow \infty$ unendlich wird.

Daß (1.8) nicht hinreichend ist, kann man am Fall eines Teilchens mit nicht allzu großer Energie sehen, das sich unter dem Einfluß eines schnell oszillierenden Potentials mit kleiner Amplitude bewegt. Dieses Potential könnte z. B. eine lokale de-Broglie-Wellenlänge $\lambda = \frac{\hbar}{|p(x)|} = 1 + \sin(qx)/q^{(3/2)}$ erzeugen. Hier wäre die WKB-Wellenfunktion (1.7) an keiner Stelle eine gute Näherung [20], wohingegen die linke Seite von (1.8) gleich $|\cos(qx)|/\sqrt{q}$ ist und für $q \rightarrow \infty$ beliebig klein wird.

1.1.2 Die Badlandsfunktion

Um nun zu einer besseren Abschätzung für die Gültigkeit der WKB-Wellenfunktion zu gelangen, bildet man die zweite Ableitung von (1.7) und erhält

$$\psi''_{WKB}(x) + \frac{p^2}{\hbar^2} \psi_{WKB}(x) - \left(\frac{3}{4} \frac{(p')^2}{p^2} - \frac{1}{2} \frac{p''}{p} \right) \psi_{WKB}(x) = 0 \quad . \quad (1.9)$$

Diese stimmt nun mit der umgeschriebenen Schrödinger-Gleichung (1.3) bis auf ein zusätzliches Potential V_{ad}

$$\frac{2m}{\hbar^2} V_{ad} = \frac{3}{4} \frac{(p')^2}{p^2} - \frac{1}{2} \frac{p''}{p} \quad (1.10)$$

überein. Somit sind die WKB-Wellenfunktionen nur dann gute Näherungen, wenn für das zusätzliche Potential V_{ad} gilt:

$$|V_{ad}| \ll \frac{p^2}{2m} \quad . \quad (1.11)$$

Es bietet sich nun an, eine „**Badlandsfunktion**“ B (siehe auch [12]) zu definieren

$$B(x) = \hbar^2 \left| \frac{3}{4} \frac{(p')^2}{p^3} - \frac{1}{2} \frac{p''}{p^3} \right| \quad , \quad (1.12)$$

und zu fordern, daß

$$B \ll 1 \quad (1.13)$$

sein soll. Ist dies in einem bestimmten Wertebereich von x erfüllt, dann ist dies ein WKB- Bereich. Trifft dies aber nicht zu, dann befindet man sich in den sogenannten „Badlands“ und die WKB-Funktionen sind dort keine brauchbaren Lösungen der Schrödinger-Gleichung. Bedingung (1.13) ist im Gegensatz zu (1.8) hinreichend und notwendig. Im Fall des zu $1/x^4$ proportionalen Potentials aus vorigem Abschnitt ist $B = 0$ für alle x und für das Potential mit der de-Broglie-Wellenlänge $\lambda = \frac{\hbar}{|p(x)|} = 1 + \sin(qx)/q^{(3/2)}$ wird B zu

$$B = \frac{1}{4} \frac{\cos(qx)}{q} - \frac{1}{2q} - \frac{1}{2} \sin(qx) \sqrt{q} \quad . \quad (1.14)$$

Der letzte Term bewirkt, daß B für $q \rightarrow \infty$ divergiert. Somit zeigt sich, daß die Badlandsfunktion (1.12) zuverlässigere Aussagen für die Gültigkeit der WKB-Näherung erlaubt als die einfachere Bedingung (1.8).

1.2 Gekoppelte Kanalgleichungen - Coupled Channel Equations

Bei Atom-Atom-Stößen oder bei der Wechselwirkung eines Atoms mit einer Oberfläche kann das Atom von seinem ursprünglichen Zustand in einen angeregten Zustand übergehen, da die Translations- (Relativ-) Bewegung des (der) Atoms (Atome) im allgemeinen an die inneren Zustände des (der) Atoms (Atome) oder der Oberflächenmoden gekoppelt ist. Um dies zu beschreiben, greift man zu dem Konzept der **gekoppelten Kanalgleichungen („coupled channel equations“)**. Nachfolgend werden wir diese Gleichungen nach [19] allgemein herleiten und erläutern.

Im folgenden soll ein physikalisches System betrachtet werden, das eine Wellenfunktion $\Psi(X, Y)$ besitzt, die von zwei Mengen von Variablen X und Y abhängt. Dann beschreibt die Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\Psi(X, Y) = E\Psi(X, Y) \quad (1.15)$$

dieses System. Sei nun \hat{O} eine Observable, die nur auf Funktionen der Variablenmenge Y wirkt, d.h. für eine Produktwellenfunktion $\psi(X)\phi(Y)$ gilt

$$\hat{O}\psi(X)\phi(Y) = \psi(X)\hat{O}\phi(Y) \quad . \quad (1.16)$$

Das zu \hat{O} gehörige Eigenwertproblem

$$\hat{O}\phi_n = \omega_n \phi_n \quad (1.17)$$

definiert eine vollständige Basis von Eigenfunktionen ϕ_n . Kommutiert nun \hat{O} mit \hat{H} ($[\hat{O}, \hat{H}] = 0$), dann kann das Problem, die vollständige Schrödinger-Gleichung (1.15) zu lösen, auf die Lösung der Schrödinger-Gleichung für jeden Eigenwert ω_n von \hat{O} reduziert werden. Jeder Eigenwert ω_n definiert einen **Kanal** und die Dynamik des reduzierten Problems in der Variablen X in einem gegebenen Kanal wird von der Bewegung in den anderen nicht beeinflusst. Wenn aber \hat{O} nicht mit \hat{H} kommutiert, dann koppeln die Kanäle aneinander. Da die ϕ_n eine vollständige Basis aller Funktionen im Y -Raum bilden, kann man jede Wellenfunktion $\Psi(X, Y)$ in dieser Basis entwickeln:

$$\Psi(X, Y) = \sum_n \psi_n(X) \phi_n(Y) \quad . \quad (1.18)$$

Die Funktionen $\psi_n(X)$ sind die **Kanalwellenfunktionen**, die durch die Lösung der Schrödinger-Gleichung bestimmt werden müssen. Setzt man den Ansatz (1.18) in die Schrödinger-Gleichung (1.15) ein, dann erhält man

$$\sum_n \hat{H} \psi_n(X) \phi_n(Y) = E \sum_n \psi_n(X) \phi_n(Y) \quad . \quad (1.19)$$

Multiplikation von links mit $\phi_m^*(Y)$ und Integration über Y liefert nun die **gekoppelten Kanalgleichungen** in der allgemeinsten Form:

$$\hat{H}_{mm} \psi_m(X) + \sum_{n \neq m} \hat{H}_{mn} \psi_n(X) = E \psi_m(X) \quad , \quad (1.20)$$

mit $\hat{H}_{mn} = \langle \phi_m | \hat{H} | \phi_n \rangle_Y$. Die diagonalen Hamiltonoperatoren \hat{H}_{mm} und die Kopplungsoperatoren \hat{H}_{mn} ($m \neq n$) sind reduzierte Operatoren, die nur auf den Raum der Wellenfunktionen $\psi(X)$ wirken. Um uns dies zu veranschaulichen, wollen wir ein etwas konkreteres System betrachten. Der Hamiltonoperator soll aus zwei Operatoren \hat{H}_X und \hat{H}_Y bestehen, die nur auf Funktionen des X - bzw. des Y -Raumes wirken und einem einfachen Kopplungspotential $V(X, Y)$:

$$\hat{H} = \hat{H}_X + \hat{H}_Y + V(X, Y) \quad (1.21)$$

Das könnte z.B. der Fall sein, wenn die X -Variablen den Abstand Atom-Oberfläche bestimmen und die Y -Variablen die Eigenzustände des Atoms beschreiben. Benutzt

man nun die Eigenfunktionen ϕ_n von \hat{H}_Y , um die Kanäle zu definieren, dann ergeben sich für die diagonalen Hamiltonoperatoren:

$$\hat{H}_{mm} = \hat{H}_X + \langle \phi_m | \hat{H}_Y | \phi_m \rangle_Y + \int dY |\phi_m(Y)|^2 V(X, Y) \quad (1.22)$$

und für die Kopplungsoperatoren:

$$\hat{H}_{mn} = V_{mn}(X) = \int dY \phi_m^* V(X, Y) \phi_n \quad , \quad m \neq n \quad . \quad (1.23)$$

Die diagonalen Hamiltonoperatoren (1.22) bestehen aus einem Operator \hat{H}_X , der in allen Kanälen identisch ist, und zusätzlich einem kanalabhängigem Potential

$$V_{mm}(X) = \int dY |\phi_m(Y)|^2 V(X, Y) + E_m \quad , \quad (1.24)$$

wobei E_m die konstante Energie

$$E_m = \langle \phi_m | \hat{H}_Y | \phi_m \rangle_Y \quad , \quad (1.25)$$

in dem jeweiligen Kanal ist. Die gekoppelten Kanalgleichungen lassen sich nun schreiben als

$$\left(\hat{H}_X + V_{mm} \right) \psi_m(X) + \sum_{n \neq m} V_{mn} \psi_n(X) = (E - E_m) \psi_m(X) \quad . \quad (1.26)$$

Für den Fall, daß die Kopplungspotentiale asymptotisch verschwinden, ist es möglich, offene und geschlossene Kanäle des Systems zu definieren. In geschlossenen Kanälen gibt es gebundene Zustände und die Energie E des gesamten Systems ist kleiner als die innere Energie E_m des Kanals (unter der Annahme, daß $V_{mn} - E_m$ asymptotisch verschwindet). In offenen Kanälen ist $E_m < E$ und wir haben eine ungebundene Bewegung. Die inneren Energien E_m definieren die Kanalschwellen und die Kontinuumsschwelle des ganzen Systems ist identisch mit der niedrigsten Kanalschwelle. Normalerweise werden, um die Rechnung zu vereinfachen, nicht alle Eigenfunktionen ϕ_n für die Entwicklung (1.18) benutzt, sondern nur die, die den wichtigsten Beitrag liefern. Wir werden uns in dieser Arbeit auf Zweikanalprobleme konzentrieren und die Schrödinger-Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_{11}(x) & V_{12}(x) \\ V_{21}(x) & V_{22}(x) \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (1.27)$$

betrachten.

1.3 Quantenreflexion

Bewegt sich in der klassischen Physik ein Teilchen in einer Dimension mit einer Energie E unter dem Einfluß eines Potentials $V(x)$, und es gilt $V(x) < E$ für alle x , dann behält es seine Bewegungsrichtung bei und ändert höchstens den Betrag seiner Geschwindigkeit. Gibt es nun aber einen Bereich in dem $V(x) > E$ (klassisch verbotener Bereich) gilt, dann darf sich das Teilchen dort nicht aufhalten und es wird am Umkehrpunkt x_0 (hier gilt $V(x_0) = E$) bzw. an dem Punkt, ab dem $V(x) > E$ ist (z. B. bei einem Stufenpotential), in den klassisch erlaubten Bereich reflektiert. In der Quantenmechanik ist es einem Teilchen aber möglich, von einem klassisch erlaubten Gebiet ($V(x) < E$) in ein anderes zu gelangen, obwohl beide durch ein klassisch verbotenes Gebiet voneinander getrennt sind. Dieses Phänomen nennt man **Tunneln**. Ein Teil des Wellenpaketes wird hierbei aber auch reflektiert.

Außerdem kann es vorkommen, daß ein Teilchen, das sich in einem klassisch erlaubten Bereich bewegt, reflektiert wird, ohne einen klassischen Umkehrpunkt zu erreichen. Diesen Effekt bezeichnet man als **Quantenreflexion**.

1.3.1 Quantenreflexion in einem Einkanalproblem

Damit man Amplitude und Wahrscheinlichkeit für die Transmission bzw. die Reflexion in einem Gebiet definieren kann, benötigt man unidirektionale Lösungen auf beiden Seiten dieses Gebietes. Ist das Potential dort konstant, dann sind die ein- und auslaufenden Wellen durch ebene Wellen $C_{\pm} e^{\pm ikx}$ (mit $k = p/\hbar$) gegeben. Wenn dies aber nicht der Fall ist, kann man die WKB-Wellen (1.7) benutzen, falls diese gute Näherungen für die Lösung der Schrödinger-Gleichung sind.

Betrachtet man nun ein von $+\infty$ kommendes Teilchen, das an einem Gebiet G reflektiert wird, dann kann man rechts von G die Lösung der Schrödinger-Gleichung, falls (1.13) gilt, schreiben als

$$\frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{\tilde{x}}^x p(x') dx' \right] + R_{WKB} \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[+\frac{i}{\hbar} \int_{\tilde{x}}^x p(x') dx' \right] \quad (1.28)$$

und links davon gilt dann für den nach $-\infty$ transmittierten Anteil

$$T_{WKB} \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{\tilde{x}}^x p(x') dx' \right] \quad . \quad (1.29)$$

Die WKB-Reflexionsamplitude R_{WKB} und die WKB-Transmissionsamplitude T_{WKB} stimmen mit den quantenmechanischen Amplituden R und T bis auf einen Phasenfaktor [12, 16] überein. Wir betrachten in der gesamten Arbeit lediglich die Beträge

obiger Größen und für diese gilt

$$\begin{aligned} |R| &= |R_{WKB}| \\ |T| &= |T_{WKB}| \quad . \end{aligned}$$

$|R|$ wird in der Literatur als Reflektivität bezeichnet und das Quadrat der Reflektivität ist die Reflexionswahrscheinlichkeit.

Auf Grund des Reziprozitätsprinzips ist die Wahrscheinlichkeit, am Gebiet G reflektiert zu werden, für ein von $+\infty$ kommendes Teilchens gleich der für ein von $-\infty$ kommendes Teilchens. Dies kann man sich für die numerische Berechnung der Reflektivität zu Nutze machen. Zur Bestimmung von R_{WKB} schlagen Coté et al. [12] vor, eine Superposition von ein- und auslaufenden WKB-Wellen an eine exakte oder sehr genaue Lösung der Schrödinger-Gleichung anzupassen, um das Gebiet, in dem WKB ungenau ist, zu überbrücken. Dazu löst man numerisch die Schrödinger-Gleichung von einem Punkt links von G , an dem (1.13) gilt, mit der Anfangsbedingung, daß die Wellenfunktion $\psi(x)$ proportional zu (1.29) ist, bis zu einem Punkt x_m , an dem wieder (1.13) erfüllt ist. Dort muß $\psi(x)$ die Form (1.28) haben. Durch Anpassen der logarithmischen Ableitung der WKB-Wellenfunktion (1.28) an die logarithmische Ableitung der numerischen Lösung erhält man

$$R_{WKB} = -\frac{\frac{\psi'(x_m)}{\psi(x_m)} - \frac{i}{\hbar}p(x_m) + \frac{p'(x_m)}{2p(x_m)}}{\frac{\psi'(x_m)}{\psi(x_m)} + \frac{i}{\hbar}p(x_m) + \frac{p'(x_m)}{2p(x_m)}} \quad (1.30)$$

und kann daraus dann die quantenmechanische Reflexionswahrscheinlichkeit bestimmen.

1.3.2 Niedrigenergieverhalten im Einkanalproblem

In mehreren Arbeiten von Eltschka et al. ([12, 17, 16] und [18]) wurde das Niedrigenergieverhalten der Reflexionswahrscheinlichkeit untersucht. Für Potentiale, die schneller als $1/x^2$ abfallen, zeigt die Reflektivität nahe der Schwelle ein lineares Verhalten

$$|R| \stackrel{k \rightarrow 0}{\approx} 1 - 2kb \quad , \quad (1.31)$$

wobei b ein charakteristischer Längenparameter² ist, der nur vom asymptotischen Verhalten des Potentials abhängt. Dieser bestimmt auch die schwelennahe Quantisierungsregel und die Zustandsdichte nahe der Schwelle. Das lineare Verhalten (1.31)

²Der Parameter b kann aus der Lösung der Schrödinger-Gleichung im asymptotischen Bereich für $E = 0$ hergeleitet werden (siehe Details in der Arbeit von Eltschka et al. [17]).

der Reflektivität kann, wie numerische Rechnungen von Moritz [35] zeigen, durch eine Exponentialform

$$|R| \stackrel{k \rightarrow 0}{\approx} \exp(-2kb) \quad , \quad (1.32)$$

ersetzt werden. Diese Form nähert $|R|$ für einen wesentlich größeren Energiebereich als (1.31) sehr gut an, da sie noch Terme in höherer Ordnung in k berücksichtigt. Für ein exponentielles Potential der Form

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}(K_0)^2 \exp\left(-\frac{x}{\beta}\right) \quad (1.33)$$

ist

$$|R| = \exp(-2\pi k\beta) \quad , \quad (1.34)$$

also $b = \pi\beta$, womit der Ausdruck (1.32) in diesem Fall sogar dem exakten Ergebnis entspricht. Interessanterweise hängt der Längenparameter nicht von der Potentialstärke K_0 ab, sondern nur von β .

Ist das Potential stufenförmig, also

$$\begin{aligned} V(x) &= -\begin{cases} V_0 & x \leq 0 \\ 0 & x > 0 \end{cases} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \begin{cases} v_0 & x \leq 0 \\ 0 & x > 0 \end{cases} \quad , \end{aligned} \quad (1.35)$$

ist die Reflektivität

$$|R| = \frac{\sqrt{k^2 + v_0} - k}{\sqrt{k^2 + v_0} + k} \stackrel{k \rightarrow 0}{\approx} 1 - 2\frac{1}{\sqrt{v_0}}k + 2\frac{k^2}{v_0} \quad , \quad (1.36)$$

und

$$b = 1/\sqrt{v_0} \quad . \quad (1.37)$$

Für Potentiale der Form (1.35) stimmt die Entwicklung der Reflektivität (1.36) bis in zweiter Ordnung in k mit der Entwicklung der exponentiellen Näherung (1.32) überein. Homogene Potentialschwänze

$$V(x) = -\frac{C_\alpha}{x^\alpha} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{(\beta_\alpha)^{(\alpha-2)}}{x^\alpha} \quad (1.38)$$

tauchen in physikalischen Problemen häufig auf, z. B. bei der Beschreibung der Wechselwirkung zwischen Atomen oder bei der Reflexion von Atomen von Oberflächen. Der in (1.38) eingeführte Längenparameter β_α steht über das Planck'sche Wirkungsquantum mit der Potentialstärke C_α in Verbindung und definiert die Skala, auf der

Quanteneffekte zu erwarten sind. Für diese Potentiale haben Trost et al. [54, 55] einen Ausdruck für b hergeleitet

$$b = \beta_\alpha \frac{\sin[\pi/(\alpha - 2)] \Gamma\left(1 - \frac{1}{\alpha-2}\right)}{(\alpha - 2)^{2/(\alpha-2)} \Gamma\left(1 + \frac{1}{\alpha-2}\right)} \stackrel{\text{def}}{=} b_\alpha \quad , \quad (1.39)$$

mit dem das Schwellenverhalten für eine Vielzahl physikalischer Prozesse bestimmt werden kann. Nimmt α große Werte an, dann wird der Längenparameter b zu π/α .

1.3.3 Hochenergieverhalten im Einkanalproblem

Verschwindet der Potentialschwanz asymptotisch schneller $1/x^2$, so entspricht der Hochenergielimes dem semiklassischen Limes³ [18] und die Reflexionsamplituden verschwinden in diesem Limes. Im Gegensatz zum schwelennahen Bereich gibt es keine allgemein gültige Formel wie (1.31) oder (1.32) für das Hochenergieverhalten, da dieses sehr stark von den Charakteristika des jeweiligen Potentials abhängt. Ist nun z.B. eine Ableitung des Potentials an einer Stelle nicht stetig, dann dominiert die niedrigste Ordnung n , bei der dies geschieht, die Reflektivität, die nun wie \hbar^n im semiklassischen Limes abfällt.

Im Falle einer Stufe (3.1) ist das Potential bereits unstetig und somit $n = 0$. Die Reflektivität (1.36) verhält sich für große Energien wie

$$|R| \stackrel{k \rightarrow \infty}{\approx} \frac{v_0}{4k^2} = \frac{V_0}{4E} \quad , \quad (1.40)$$

und fällt somit ab wie \hbar^0 . Sind nun alle Ableitungen des Potentials stetig, dann verschwindet die Reflektivität normalerweise exponentiell. Für große Energien wird die Badlandsfunktion (1.12) immer kleiner und ist stärker in dem Bereich lokalisiert, wo die potentielle Energie ungefähr der kinetischen Energie entspricht (siehe [20]). Basierend auf einer störungstheoretischen Behandlung der Badlandsfunktion haben Prokovskii et al. [45, 46] eine asymptotische Näherung für die Reflexionsamplitude R hergeleitet:

$$R \sim -i \exp\left(\frac{2i}{\hbar} \int^{x_t} p(x) dx\right) \quad , \quad (1.41)$$

wobei x_t der komplexe Wendepunkt mit dem kleinsten positiven Imaginärteil ist. Ausgehend von Ausdruck (1.41) haben Friedrich et al. [20] für die homogenen Potentiale (1.38) eine Formel für das Hochenergieverhalten der Reflektivität aufgestellt.

³Vom semiklassischen Limes spricht man, wenn \hbar klein gegenüber den im System auftretenden Wirkungen ist.

α	3	4	5	6	7	8
B_α	2.24050	1.69443	1.35149	1.12025	0.95450	0.83146

TABELLE 1.1: Die Koeffizienten B_α , die durch Gleichung (1.44) gegeben sind und die im Ausdruck (1.43) für das Hochenergieverhalten von R stehen. Aus [20].

Der komplexe Umkehrpunkt mit den kleinsten Imaginärteil ist in diesem Fall

$$x_{t,\alpha} = \left[\cos\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) + i \sin\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) \right] k^{-2/\alpha} (\beta_\alpha)^{1-2/\alpha} . \quad (1.42)$$

Führt man nun das Integral in Formel (1.41) entlang des Weges $x = \Re(x_{t,\alpha}) + i\xi\Im(x_{t,\alpha})$, $\xi = 0 \rightarrow 1$ aus⁴, dann erhält man für die Reflektivität

$$|R_\alpha| \stackrel{k \rightarrow \infty}{\sim} \exp(-B_\alpha (k\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}) , \quad (1.43)$$

mit den Koeffizienten

$$B_\alpha = 2 \sin\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) \Re \left\{ \int_0^1 \sqrt{1 + \left(\cos\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) + i \xi \sin\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) \right)^{-\alpha}} d\xi \right\} . \quad (1.44)$$

Die Koeffizienten B_α werden in Tabelle 1.1 für die α -Werte 3,...,8 aufgeführt. Für große Werte von α wird der Realteil des Integrals in Gleichung (1.44) Eins und damit wird $B_\alpha \sim 2\pi/\alpha$. Somit stimmt im Grenzfall hoher Potenzen α das Hochenergieverhalten (1.43) mit dem Niedrigenergieverhalten (1.32) überein.

Betrachten wir nun das exponentielle Potential (1.33). Die komplexen Umkehrpunkte sind durch

$$x_t^{(n)} = \beta \left[-2 \ln\left(\frac{k}{K_0}\right) + (2n+1)i\pi \right], \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.45)$$

gegeben und $n = 0$ entspricht dem Umkehrpunkt mit dem kleinsten Imaginärteil. Führt man das Integral in Gleichung (1.41) entlang des Weges $x = -2 \ln[k/K_0]\beta + \xi i\pi\beta$, $\xi = 0 \rightarrow 1$ aus [20], dann liefert dies für den Reflexionskoeffizienten

$$R \sim -i \exp(-2\pi k\beta) . \quad (1.46)$$

Das stimmt mit dem exakten Ergebnis (1.34) für $|R|$ überein, welches für alle Energien gilt.

⁴Ein Weg entlang der reellen Achse liefert nur reelle Beiträge und hat somit nur Auswirkungen auf die Phase von R .

1.4 Nichtadiabatische Übergänge

Das Konzept der **adiabatischen** Zustände ist in vielen naturwissenschaftlichen Disziplinen weit verbreitet. Es beruht darauf, daß es möglich ist, ein System mit Hilfe von zwei Variablenmengen zu beschreiben, wobei das System zu jedem beliebigen Wert der einen Variablenmenge, die sich langsam im Vergleich zur anderen Variablenmenge verändert, durch einen Eigenzustand wohldefiniert ist [36]. Die sich langsam verändernden Variablen nennt man die adiabatischen Variablen und die Eigenzustände sind die adiabatischen Zustände⁵. Ändern sich die Variablen hingegen sehr schnell, dann nennt man die Variablen diabatisch. Ein Beispiel für die Anwendung des Konzepts der adiabatischen Zustände ist die Born-Oppenheimer-Näherung, die benutzt wird, um die molekularen Eigenzustände zu berechnen. Hier werden die Elektronen und Kerne getrennt voneinander behandelt, wobei der gegenseitige Einfluß ihrer Bewegungen bewahrt bleibt. Da die Elektronen über eine viel kleinere Masse als die Kerne verfügen, bewegen sie sich viel schneller als diese und können sehr schnell ihren Zustand an die langsamere Kernbewegung anpassen. So sind die Elektronen zu jedem Zeitpunkt in einem näherungsweise gebundenen Zustand, so als ob sich die Kerne an festen klassischen Orten befinden würden. Das ist die adiabatische Näherung für die Elektronen, die Kerne hingegen werden durch semiklassische Methoden beschrieben. Bei bestimmten Kernabständen können sich nun aber zwei adiabatische Zustände sehr nahe kommen⁶, und ein geringer Energiebeitrag aus der Kernbewegung kann dazu führen, daß dort die Elektronen von einem adiabatischen Zustand in den anderen übergehen. Dies bezeichnet man als nichtadiabatischen Übergang [36]. Solche Übergänge tauchen auch in vielen anderen Fällen auf, wie z. B. bei photochemischen Prozessen, organischen Reaktionen [33, 49] oder in der Photosynthese [7].

1.4.1 Das Landau-Zener-Modell

Die ersten Versuche, solche nichtadiabatischen Übergänge zu beschreiben, wurden 1932 unabhängig voneinander von Landau [25, 26] und Zener [60] unternommen. Landau betrachtet das zeitunabhängige curve-crossing-Problem für einen Zweikanalfall (wie in Schrödinger-Gleichung (1.27) dargestellt; die V_{ij} , $i, j = 1, 2$ sind dort

⁵In unserem Beispiel aus Kapitel 1.2 wären die Y -Variablen die adiabatischen Parameter des Systems, falls das System in seinem Zustand verbleibt.

⁶Adiabatische Zustände können sich im Gegensatz zu diabatischen nicht kreuzen. Schneiden sich die zu den adiabatischen Zuständen gehörigen diabatischen Potentiale, spricht man vom „**curve crossing**“.

die diabatischen Potentiale). Ausgangspunkt war die störungstheoretische Formel für die Übergangswahrscheinlichkeit p zwischen zwei Zuständen ψ_1 und ψ_2 :

$$p \simeq \left| \int \psi_1(x) f(x) \psi_2(x) dx \right|^2, \quad (1.47)$$

wobei $f(x)$ die Kopplung zwischen den beiden Zuständen beschreibt. Mit dem nach ihm benannten komplexen Umlaufintegralverfahren, der Landau-Methode [27], löste er das obige Integral in der komplexen Ebene zusammen mit der Verwendung von WKB-Funktionen für ψ_1 und ψ_2 und erhielt für p den Ausdruck

$$p \simeq \exp \left(-2\Im \left(\int_{\Re(X_*)}^{X_*} \sqrt{k_1 - k_2} dx \right) \right), \quad (1.48)$$

mit $k_j = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - W_{jj})}$, $j = 1, 2$. $W_{11} < W_{22}$ sind die diabatischen Potentiale des Systems. X_* bezeichnet den komplexen Schnittpunkt der diabatischen Potentiale: $W_{11}(X_*) = W_{22}(X_*)$.

Betrachtet man nun den Spezialfall, daß die diabatischen Potentiale V_{11} und V_{22} linear sind, die Kopplung $V_{12} = V_{21}$ konstant ist und, daß die Bewegung sich mit einer konstanten Geschwindigkeit v vollzieht, dann erhält man die bekannte Landau-Zener-Formel:

$$p_{LZ} = \exp \left(-\frac{2\pi V_{12}^2}{\hbar v |\Delta F|} \right), \quad (1.49)$$

wobei $\Delta F = F_1 - F_2 = \frac{dV_{11}}{dx} - \frac{dV_{22}}{dx}$ die Differenz der Steigungen der beiden diabatischen Potentiale V_{11} und V_{22} ist.

Zener hingegen hat in seiner Arbeit die zu (1.27) zeitabhängige Schrödinger-Gleichung betrachtet. Um das Problem analytisch lösen zu können, wurden zwei Annahmen gemacht. Erstens sollte die Kopplung V_{12} am Schnittpunkt x_0 der beiden diabatischen Potentiale sehr viel kleiner als die kinetische Energie des Systems sein, womit die Ortskoordinate x eine bekannte Funktion der Zeit wäre. Außerdem soll die Region, in der der Übergang stattfindet, so klein sein, daß $V_{11} - V_{22}$ als lineare Funktion der Zeit angenommen werden kann, was für eine genügend kleine Kopplung V_{12} am Schnittpunkt erfüllt ist. Zudem ist in diesem Fall auch die Annahme, daß V_{12} , ψ_1 und ψ_2 dort zeitunabhängig sind, gerechtfertigt. Da nur der Übergangsbereich wichtig sein sollte, wurden diese Annahmen für alle Zeiten ausgedehnt. Dies erlaubte nun Zener, das Problem auf die Weber'schen Differentialgleichungen zurückzuführen und somit analytisch lösen zu können. Er erhielt damit das gleiche Ergebnis wie Landau. Die von Zener geforderte Linearität des Potentials in der Zeit ist sehr verschieden

von der räumlichen Linearität im Modell von Landau [36]. In Landaus Betrachtung entspricht die zeitabhängige lineare Näherung einer Bewegung, die mit konstanter Geschwindigkeit entlang einer Bahn stattfindet, also $x = vt$. Deshalb entspricht die Landau-Zener-Formel (LZ-Formel) (1.49) dem exakten zeitabhängigen Modell von Zener, aber im zeitunabhängigen linearen Modell, gilt dies nur für Energien, die viel größer sind als die potentielle Energie am Kreuzungspunkt. Zudem kann im zeitabhängigen linearen Modell der Einfluß von Umkehrpunkten nicht berücksichtigt werden. Dazu muß die Zeit mindestens quadratisch berücksichtigt werden.

1.4.2 Die Zhu-Nakamura-Theorie

Die Landau-Zener-Formel (1.49) erlaubt es, mit Hilfe der Eigenschaften der diabatischen Potentiale am Kreuzungspunkt x_0 , die Übergangswahrscheinlichkeit von dem einen Zustand in den anderen zu berechnen. Leider sind die diabatischen Zustände nicht immer bekannt und die Annahmen, die zur Herleitung gemacht wurden, sind nicht immer gerechtfertigt. So kann man von einer konstanten Geschwindigkeit nur bei hohen Stoßenergien ausgehen, zudem ist die lineare Näherung am Kreuzungspunkt nicht in jedem Fall berechtigt. Deswegen gab es in den letzten Jahrzehnten, seit Entdeckung der Formel, sehr viele Versuche, diese zu verbessern und Schwachpunkte zu beseitigen (siehe z.B. [14, 36, 39, 40] und die darin enthaltenen Referenzen.). Wir wollen an dieser Stelle nur kurz die Grundzüge der Arbeit von Nakamura und Zhu vorstellen und ansonsten auf die Originalarbeiten verweisen, die in [36] zitiert werden. Ihre Idee besteht darin, die Stokes-Konstanten (siehe unten) für diesen Prozeß zu bestimmen und daraus dann die Wahrscheinlichkeit für den nichtdiabatischen Übergang zu berechnen.

Der Startpunkt ihrer Analyse war die Streumatrix \mathbf{S} , die es erlaubt, eine Beziehung zwischen einem Anfangszustand Ψ_A eines Systems und seines Endzustandes Ψ_E herzuleiten:

$$\Psi_E = \mathbf{S}\Psi_A \quad . \quad (1.50)$$

Somit können die WKB-Lösungen in den asymptotischen Bereichen entlang der reellen Achse miteinander verbunden werden. Um diese Matrix zu bestimmen, wurde das Problem in die komplexe Ebene verlagert, da die WKB-Funktionen auch dort gültig sind. Es ist aber durch keine Linearkombination von asymptotischen Lösungen, die nur einen einzigen Wert für den ganzen Wertebereich des Arguments (0 bis 2π) haben, möglich, eine allgemeingültige Lösung zu erhalten. Vielmehr müssen die Linearkombinationen, je nachdem in welchem Wertebereich das Argument sich be-

findet, ihren Wert ändern und diese Änderungen stehen in Zusammenhang mit den **Stokes-Linien**⁷. Jeder Wechsel wird durch eine komplexe Konstante, der sogenannten **Stokes-Konstante**, repräsentiert, die mit der jeweiligen Stokes-Linie verbunden ist; dies wird auch als das Stokes-Phänomen bezeichnet. Nakamura und Mitarbeitern gelang es so, für zwei lineare Potentiale, die über ein konstantes Potential aneinander gekoppelt sind, eine exakte quantenmechanische Lösung für die Übergangswahrscheinlichkeit anzugeben. Dazu reduzierten sie die Schrödinger-Gleichung für dieses Problem auf eine einzige Differentialgleichung 2. Ordnung mit einem Polynom 4. Ordnung für die Koeffizienten. Aus der Analyse der Stokes-Linien, die ihren Ursprung in den Nullstellen der Koeffizienten (den sogenannten Übergangspunkten) haben, gelang es ihnen, die sechs Stokes Konstanten zu bestimmen. Da es möglich ist, zwischen diesen Beziehungen aufzustellen, konnte die Streumatrix durch nur eine einzige Stokes Konstante U_1 ausgedrückt werden, die durch die Konstanten a^2 und c^2

$$a^2 = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \frac{F(F_1 - F_2)}{8V_{12}^3(x_0)} \quad (1.51)$$

$$c^2 = (E - V_{11}(x_0)) \frac{F_1 - F_2}{2FV_{12}(x_0)} \quad , \quad F = \sqrt{F_1 F_2} \quad (1.52)$$

mittels einer konvergenten unendlichen Reihe gegeben ist⁸. Da dieser Ausdruck für U_1 nicht sehr handlich ist, haben sie eine semiklassische Analyse durchgeführt und das durch vier Übergangspunkte definierte Problem durch ein Paar von zwei Übergangspunkten ersetzt. Um dies zu bewerkstelligen, wurde das Verhalten der Übergangspunkte und der Stokes-Linien im ganzen Wertebereich von a^2 und c^2 untersucht. Weiterhin haben sie die semiklassischen Ausdrücke für U_1 so umgeschrieben, daß sie für allgemeine curve crossing Probleme angewandt werden können⁹. Somit ergibt sich für die Übergangswahrscheinlichkeit bei Stoßenergien, die größer sind als die potentielle Energie am Kreuzungspunkt x_0 ,

$$p_{NZ} = \exp \left[-\frac{\pi}{4ac} \left(\frac{2}{1 + \sqrt{1 + c^{-4}}} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad . \quad (1.53)$$

⁷Das bedeutet, daß die Koeffizienten der Linearkombination nicht über den ganzen Argumentebereich hin konstant bleiben.

⁸Nakamura und Zhu bezeichnen den Parameter c^2 in ihrer Arbeit mit b^2 . Wir haben diese Umbenennung durchgeführt, da wir eine Verwechslung mit dem Längenparameter b , der das Niedrigenergieverhalten der Quantenreflexion charakterisiert, vermeiden wollten.

⁹Die Grundlage für diese Formeln ist weiterhin die Linearisierung der Potentiale am Kreuzungspunkt

Zusätzlich geben die Autoren auch eine Formel mit empirischen Korrekturen an:

$$p_{NZK} = \exp \left[-\frac{\pi}{4ac} \left(\frac{2}{1 + \sqrt{1 + c^{-4} (0.4a^2 + 0.7)}} \right)^{\frac{1}{2}} \right] . \quad (1.54)$$

Mit den verwendeten dimensionslosen Parametern a^2 und c^2 liest sich die ursprüngliche Landau-Zener-Formel (1.49) wie

$$p_{LZ} = \exp \left(-\frac{\pi}{4ac} \right) . \quad (1.55)$$

Die Variable a^2 ist ein Maß für die Stärke der diabatischen Kopplung und c^2 beschreibt die effektive Stoßenergie. Zhu und Nakamura geben in ihrer Arbeit noch an, wie a^2 und c^2 aus den adiabatischen Potentialen gewonnen werden können, die im Normalfall, im Gegensatz zu den diabatischen Potentialen, bekannt sind.

KAPITEL 2

Allgemeine Eigenschaften von Zweikanalproblemen

Der Ausgangspunkt für unsere Untersuchungen soll die Zweikanal-Schrödinger-Gleichung (1.27)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_{11}(x) & V_{12}(x) \\ V_{21}(x) & V_{22}(x) \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

in der diabatischen Darstellung sein (siehe [30]). Eine Möglichkeit, diese gekoppelten Kanalgleichungen zu lösen, besteht darin, den Vektor der Kanalwellenfunktionen von der diabatischen Basis in die adiabatische Basis zu transformieren, wobei die Potentialmatrix \mathbf{V} , die wir als hermitesch annehmen ($V_{12}(x) = V_{21}(x)$), diagonalisiert wird. Dies wird durch die unitäre Transformation \mathbf{U}

$$\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \mathbf{U} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U}\mathbf{V}\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{W} = \begin{pmatrix} W_{11}(x) & 0 \\ 0 & W_{22}(x) \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

erreicht und die diagonalisierten adiabatischen Potentiale sind

$$W_{11}(x) = \frac{V_{11}(x) + V_{22}(x)}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{(V_{11}(x) - V_{22}(x))^2 + |2V_{12}(x)|^2}, \quad (2.3)$$

$$W_{22}(x) = \frac{V_{11}(x) + V_{22}(x)}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(V_{11}(x) - V_{22}(x))^2 + |2V_{12}(x)|^2}. \quad (2.4)$$

Aus Gleichung (2.3) folgt, daß je stärker das Kopplungspotential $|V_{12}(x)|$ ist, desto attraktiver wird das niedrigere adiabatische Potential $W_{11}(x)$. Das höhere adiabatische Potential $W_{22}(x)$ hingegen wird mit zunehmenden $|V_{12}(x)|$ immer weniger

attraktiv oder sogar repulsiv. Wenn die Potentialmatrix nicht nur hermitesch, sondern auch reell und symmetrisch ist, dann wird die unitäre Matrix \mathbf{U} durch einen reellen Mischungswinkel α bestimmt:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}, \quad \alpha(x) = \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{2V_{12}(x)}{V_{11}(x) - V_{22}(x)} \right). \quad (2.5)$$

Der durch Gleichung (2.5) definierte Winkel kann so gewählt werden, daß er in einem Intervall

$$0 \leq \alpha \leq \pi/2 \quad (2.6)$$

liegt. Der Wert $\alpha = 0$ entspricht dem Fall, daß es keine Kopplung gibt, womit die adiabatischen Kanäle den diabatischen entsprechen. Die Mischung der Kanäle ist für $\alpha = \pi/4$ maximal und die adiabatischen Kanäle enthalten die diabatischen Komponenten zu gleichen Teilen. Ist $\alpha > \pi/4$, dann enthält der adiabatische Kanal 1 den diabatischen Kanal 2 zu einem größeren Anteil als den diabatischen Kanal 1 und umgekehrt. Für $\alpha \rightarrow \pi/2$ sind die Kanäle nicht wirklich gekoppelt, sondern die unitäre Transformation (2.2) entspricht im wesentlichen einer Umbenennung der Kanäle. Setzt man nun $\Psi = \mathbf{U}^{-1}\Phi$ aus der Gleichung (2.2) in die gekoppelte Kanalgleichung (2.1) ein und multipliziert von links mit \mathbf{U} , dann erhält man folgende neue Gleichungen:

$$\begin{aligned} \phi_1'' - W_{11}(x) \phi_1 + E \phi_1 - \alpha'^2 \phi_1 - \alpha'' \phi_2 - 2\alpha' \phi_2 &= 0 \\ \phi_2'' - W_{22}(x) \phi_2 + E \phi_2 - \alpha'^2 \phi_2 + \alpha'' \phi_1 + 2\alpha' \phi_1 &= 0. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Die adiabatischen Gleichungen (2.7) entkoppeln nur für den Fall, daß α' gleich Null ist, was der Fall ist, wenn die Potentiale konstant sind, oder wenn alle Potentiale die gleiche Ortsabhängigkeit haben:

$$V_{ij}(x) = c_{ij} f(x), \quad c_{ij} = \text{const.} \quad (2.8)$$

Wir wollen nun untersuchen, ob für Potentiale, die obige Eigenschaften (2.8) nicht besitzen, in bestimmten Bereichen die Gleichungen (2.7) dennoch entkoppeln. Als erstes betrachten wir eine Potentialmatrix, deren Einträge aus homogenen Potentialen besteht, mit unterschiedlichen Potenzen in den Diagonal- und Nichtdiagonalelementen

$$\mathbf{V}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} -\frac{A}{x^n} & \frac{D}{x^m} \\ \frac{D}{x^m} & -\frac{B}{x^n} + E_0 \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Der Mischungswinkel α ist dann

$$\alpha = \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{2Dx^{n-m}}{A - B + E_0 x^n} \right) \quad (2.10)$$

und seine erste Ableitung ergibt sich zu

$$\alpha' = Dx^{n-m-1} \frac{(A-B)(n-m) - E_0mx^n}{(A-B + E_0x^n)^2 + 4D^2x^{2(n-m)}} \quad . \quad (2.11)$$

Im Limes großer Abstände vereinfacht sich der Ausdruck (2.11) zu

$$\alpha' \stackrel{x \rightarrow \infty}{\approx} -\frac{Dm}{E_0x^{m+1}} \quad . \quad (2.12)$$

Dieser Ausdruck geht für große Werte von x gegen Null und somit entkoppeln die Gleichungen (2.7) asymptotisch. Nahe dem Ursprung ($x \rightarrow 0$) muß man unterscheiden, welche Potentiale, die diagonalen oder die nichtdiagonalen, eine größere Reichweite haben:

$$\alpha' \stackrel{x \rightarrow 0}{\approx} \begin{cases} D \frac{n-m}{A-B} x^{n-m-1} & , \quad n > m \\ \frac{1}{4} \frac{(A-B)(n-m)}{D} x^{m-n-1} & , \quad n < m \end{cases} \quad . \quad (2.13)$$

Der Ausdruck (2.13) geht für kleine Werte von x gegen Null, falls die Differenz $|m-n| \neq 1$ und die adiabatischen Gleichungen (2.7) entkoppeln. Andernfalls geht α' gegen einen konstanten Wert und die Gleichungen bleiben gekoppelt.

Somit entkoppeln die Gleichungen (2.7) asymptotisch für beliebige Werte der Potenzen, während sie nahe dem Ursprung nur für den Fall entkoppeln, daß die Differenz der Potenzen ungleich Eins ist.

Ein anderer sehr interessanter Fall ist eine aus exponentiellen Funktionen bestehende Potentialmatrix, welche Nikitin [40] als Verallgemeinerung für das Landau-Zener-Modell vorgeschlagen hat. Wir wollen hier eine etwas allgemeinere Form als Nikitin oder Nakamura und Mitarbeiter [41, 42, 43, 44] betrachtet haben, untersuchen:

$$\mathbf{V}(x) = \begin{pmatrix} U_1 - V_1 e^{-\gamma x} & V_{12} e^{-\beta x} \\ V_{12} e^{-\beta x} & U_2 - V_2 e^{-\gamma x} \end{pmatrix} \quad , \quad \beta, \gamma > 0 \quad . \quad (2.14)$$

Der Mischungswinkel ist in diesem Fall

$$\alpha = \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{2V_{12} e^{-\beta x}}{U_2 - U_1 + (V_1 - V_2) e^{-\gamma x}} \right) \quad (2.15)$$

und für die Ableitung gilt

$$\alpha' = \frac{V_{12} (e^{-(\gamma+\beta)x} (V_1 - V_2) (\gamma - \beta) - \beta e^{-\beta x} (U_2 - U_1))}{(U_2 - U_1)^2 + (V_1 - V_2)^2 e^{-2\gamma x} + 2(U_2 - U_1) (V_1 - V_2) e^{-\gamma x} + 4V_{12}^2 e^{-2\beta x}} \quad . \quad (2.16)$$

Für große positive Werte von x vereinfacht sich Gleichung (2.16) zu

$$\alpha' \stackrel{x \rightarrow \infty}{\approx} V_{12} \frac{e^{-(\gamma+\beta)x} (V_1 - V_2) (\gamma - \beta) - \beta e^{-\beta x} (U_2 - U_1)}{(U_2 - U_1)^2} . \quad (2.17)$$

Da dieser Ausdruck im Limes $x \rightarrow \infty$ gegen Null geht, entkoppeln dort auch die adiabatischen Gleichungen (2.7). Im Limes $x \rightarrow -\infty$ wird (2.16) zu

$$\alpha' \stackrel{x \rightarrow -\infty}{\approx} V_{12} \frac{(V_1 - V_2) (\gamma - \beta)}{(V_1 - V_2)^2 e^{(\beta-\gamma)x} + 4V_{12}^2 e^{(\gamma-\beta)x}} , \quad (2.18)$$

was nur für den Fall Null wird, daß entweder beide diabatischen Potentiale die gleichen Exponenten $\gamma = \beta$ haben oder die Potentialstärken V_1 und V_2 identisch sind. Somit entkoppeln die adiabatischen Gleichungen immer bei $+\infty$, während sie bei $-\infty$ im Normalfall gekoppelt sind.

In den Bereichen, in denen die Gleichungen (2.7) nicht miteinander gekoppelt sind, können wieder die WKB-Wellenfunktionen (1.7) als Lösung der entkoppelten adiabatischen Schrödinger-Gleichungen angesetzt werden, falls die Bedingung (1.13) dort ebenfalls erfüllt ist.

KAPITEL 3

Gekoppelte Stufenpotentiale

Ziel dieses Abschnittes ist es, am Beispiel von gekoppelten Stufenpotentialen, den Einfluß der Kanalkopplung auf die Quantenreflexion für Energien nahe der Schwelle und darüber hinaus zu untersuchen. Dazu betrachten wir eine Potentialmatrix¹ der Form

$$\mathbf{V}_{ij}(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \begin{cases} -v_{ij}, & x \leq 0 \\ \varepsilon_i \delta_{ij}, & x > 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

Dieses einfache Modell (siehe dazu die Illustration in Abbildung 3.1) enthält nicht nur alle wichtigen Eigenschaften der Quantenreflexion, sondern auch die der Kanalkopplung. Der obere Bereich der Stufen ($x > 0$) modelliert den asymptotischen Bereich der einkommenden und auslaufenden Wellen und die andere Seite ($x < 0$) steht für den inneren semiklassischen Bereich, in welche das Teilchen reflektiert wird, wenn es nicht von der Quantenreflexion beeinflusst wird. Die Badlands reduzieren sich hier auf einen einzigen Punkt ($x = 0$), an dem die Potentiale nicht stetig sind. Bei einer ersten Betrachtung wird man den Einwand bringen, daß ein Stufenpotential, mit seiner Unstetigkeit, ein schlechtes Modell für die stetigen Potentiale darstellt, welche die physikalischen Prozesse bestimmen. So haben Potentiale, die Atom-Atom oder Atom-Oberflächen Wechselwirkungen beschreiben, van-der-Waals-Potentialschwänze, die sich wie $-1/x^6$ und $-1/x^3$, bzw. wie $-1/x^7$ und $-1/x^4$ bei großen Abständen verhalten, wenn man Retardierungseffekte berücksichtigt. Bei niedrigen Energien wird die Reflektivität vom dem Längenparameter b (siehe (1.31) und (1.32)) bestimmt und nur bei relativ hohen Energien spielt die Form des Potentials eine wichtige Rolle [20]. Wie wir aus Abschnitt 1.3.2 wissen, ist für ein Stufenpotential (1.35) $b = 1/\sqrt{v_0}$. Aus der Formel (1.39) für homogene

¹Der Potentialsprung wird bei allen Stufen an der gleichen Stelle angenommen, der oBdA als $x = 0$ gewählt wird.

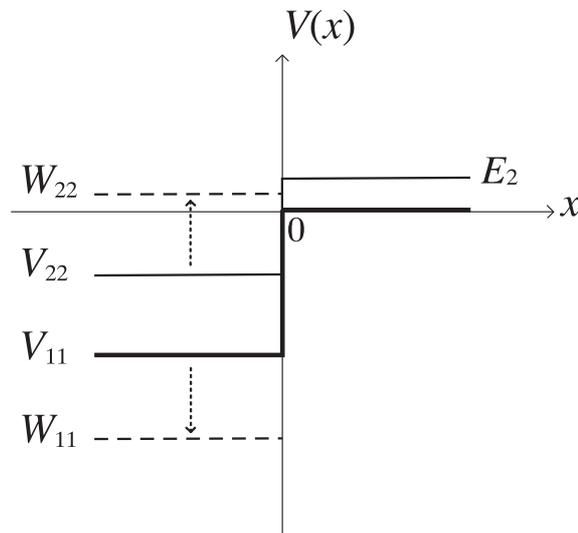


ABBILDUNG 3.1: Schematische Illustration der gekoppelten Stufenpotentiale. Die diabatischen Kanäle mit konstanter potentieller Energie $E_1 = 0$ und $E_2 = \hbar^2 \varepsilon_2 / (2m)$ sind für $x > 0$ in dieser Region entkoppelt. Für $x < 0$ ist die diabatische Potentialmatrix $V_{ij} = -\hbar^2 v_{ij} / (2m)$, und die diagonalisierten adiabatischen Potentiale sind $W_{ii} = -\hbar^2 w_{ii} / (2m)$. Aus [30].

Potentiale (1.38) erhalten wir für den Längenparameter für die Potenzen $\alpha = 4$, $b = \beta_4$ und für $\alpha = 6$, $b = \beta_6$ $[\Gamma(\frac{3}{4}) / (2\sqrt{2}\Gamma(\frac{3}{4}))] \approx 0.4779 \beta_6$. Abbildung 3.2 zeigt $|R|$ als Funktion der Wellenzahl k für ein Stufenpotential und für homogene Potentialschwänze mit den Potenzen $\alpha = 4$ und $\alpha = 6$. Mit zunehmender Potenz α wird die Energieabhängigkeit der Reflektivität durch das Stufenpotential für wesentlich höhere Energien immer besser wiedergegeben. Somit kann man erwarten, daß das relativ einfache Modell charakteristische Eigenschaften realistischerer Potentiale wiedergibt.

3.1 Allgemeine Betrachtungen

Mit der geeigneten Eichung der Energie und Nummerierung der Kanäle kann man für die Potentialmatrix (3.1) oBdA annehmen, daß $\varepsilon_2 \geq \varepsilon_1 = 0$. Außerdem wollen wir für die Matrix \mathbf{V} fordern, daß sie hermitesch ist und für eine geeignete Wahl der Kanalwellenfunktionen können wir sie als reell und symmetrisch ($v_{21} = v_{12} \geq 0$) annehmen. Zudem sollen die diabatischen (diagonalen) Potentiale attraktiv für von rechts kommende Teilchen sein, also $v_{ii} \geq 0$. Für $x > 0$ sind die Kanäle in der

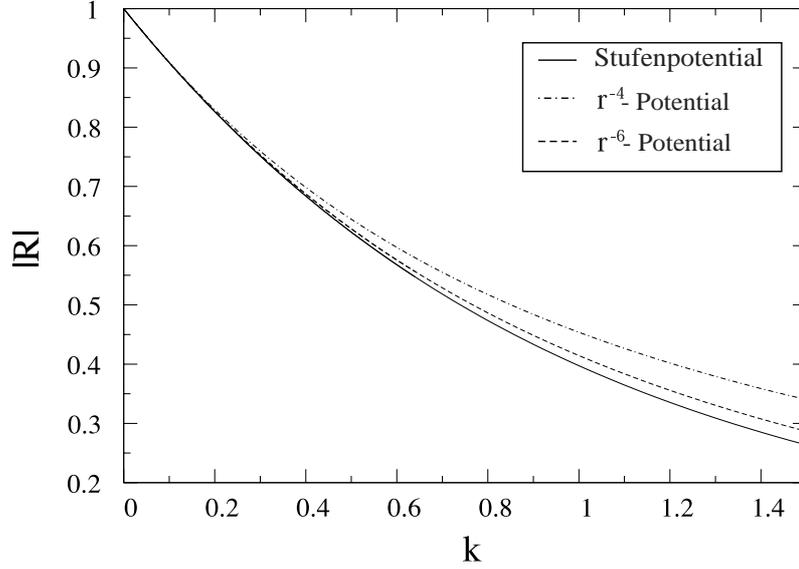


ABBILDUNG 3.2: Die Reflektivität $|R|$ als Funktion von k für homogene Potentialschwänze $V \sim -\hbar^2(\beta_\alpha)^{\alpha-2}/(2mx^\alpha)$ mit $\alpha = 4$ und $\alpha = 6$ und für ein Stufenpotential der Tiefe $\hbar^2 v_0/(2m)$. Die Potentialparameter der drei Potentiale wurden so gewählt, daß der Längenparameter $b = 1/\sqrt{v_0} = \beta_4 = 0.4779\beta_6$, der das Schwellenverhalten (1.31) bestimmt, gleich 1 in allen Fällen ist. Nach [30].

diabatischen Basis (3.1) entkoppelt und für $x < 0$ sind sie gekoppelt. Da die Potentialmatrix in diesem Bereich konstant ist, ist der Mischungswinkel (2.5) unabhängig von x :

$$\alpha(x) := \alpha = \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{2v_{12}}{v_{11} - v_{22}} \right), \quad x < 0, \quad (3.2)$$

und die adiabatischen Potentiale (2.3) und (2.4) sind dann:

$$W_{11} = -\frac{\hbar^2}{2m} w_{11}, \quad W_{22} = -\frac{\hbar^2}{2m} w_{22}, \quad x < 0, \quad (3.3)$$

mit den konstanten Potentialstärkeparametern

$$w_{11,22} = \frac{v_{11} + v_{22}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(v_{11} - v_{22})^2 + (2v_{12})^2}. \quad (3.4)$$

Wie man an Gleichung (3.4) sieht, ist $w_{11} \geq w_{22}$ und somit hat der adiabatische Kanal 1 immer das niedrigere Potential. Ist nun der diabatische Kanal 1 tiefer als der diabatische Kanal 2 ($v_{11} \geq v_{22}$), dann variiert das Argument des Arcustangens in Gleichung (3.2) mit zunehmender Stärke der Kopplung im Vergleich zur Differenz

der diagonalen Potentiale von Null bis Unendlich. Der Mischungswinkel α variiert dementsprechend von Null bis $\pi/4$ und deckt damit den Bereich zwischen schwacher und starker Kopplung (Mischung) ab. Ist aber $v_{11} < v_{22}$, dann wird das Argument des Arcustangens in Gleichung (3.2) negativ und α bewegt sich zwischen den Werten $\pi/4$ und $\pi/2$. Die Kopplung wird schwächer, wenn der Wert von α von $\pi/4$ auf $\pi/2$ ansteigt, aber die Transformation in die adiabatischen Kanäle führt nun zu einer Umbenennung der Kanäle. Der Grenzwert $\alpha = \pi/2$ steht für verschwindende Kopplung und $v_{11} < v_{22}$. In diesem Fall ist dann $\phi_1 = \psi_2$ und $\phi_2 = -\psi_1$.

Wir wollen für die weitere Betrachtung annehmen, daß die Gesamtenergie $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ nicht-negativ ist. Im Bereich $x > 0$ ist der ungekoppelte Kanal 1 immer für elastische Reflexion offen, während der Kanal 2 nur dann für inelastische Reflexion offen ist, wenn $k^2 > \varepsilon_2$ ist, ansonsten ($0 \leq k^2 < \varepsilon_2$) ist er geschlossen. Da für $x < 0$ gilt, daß $w_{11} \geq v_{11} \geq 0$ ist, ist dort der untere adiabatische Kanal immer offen für Transmission. Der obere adiabatische Kanal ist für $k^2 + w_{22} \geq 0$ offen für die Transmission, während er für $k^2 + w_{22} < 0$ geschlossen ist. Wenn die Kopplung stark genug ist, ist w_{22} negativ und somit der obere adiabatische Kanal repulsiv, weshalb in diesem Fall die Transmissionsschwelle $-W_{22}$ bei positiven Gesamtenergien liegt. Zuerst wollen wir den Fall betrachten in dem sowohl die beiden diabatischen Kanäle im Bereich $x > 0$, als auch die beiden adiabatischen Kanäle im Bereich $x < 0$ offen sind, also $k^2 \geq \varepsilon_2$, $-w_{22}$ gilt. Die (ungekoppelte) Zweikanalwellenfunktion, die ein in Kanal 1 einlaufendes Teilchen beschreibt, lautet

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ik_1 x} + R_{11} e^{ik_1 x} \\ R_{12} e^{ik_2 x} \end{pmatrix} \quad \text{für } x > 0, \quad \text{mit} \quad \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k \\ \sqrt{k^2 - \varepsilon_2} \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Im Bereich $x < 0$ erhält man für die Wellenfunktion in der adiabatischen Darstellung

$$\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} e^{-iq_1 x} \\ T_{12} e^{-iq_2 x} \end{pmatrix} \quad \text{für } x < 0, \quad \text{mit} \quad \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{k^2 + w_{11}} \\ \sqrt{k^2 + w_{22}} \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

und die entsprechende Wellenfunktion in der diabatischen (gekoppelten) Darstellung lautet

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} e^{-iq_1 x} \cos \alpha - T_{12} e^{-iq_2 x} \sin \alpha \\ T_{11} e^{-iq_1 x} \sin \alpha + T_{12} e^{-iq_2 x} \cos \alpha \end{pmatrix} \quad \text{für } x < 0. \quad (3.7)$$

Durch Anpassen der Wellenfunktionen (3.5) und (3.7) und deren Ableitungen am Punkt $x = 0$ kann man die Reflexionsamplituden R_{1j} und die Transmissionsamplituden T_{1j} , $j = 1, 2$ bestimmen:

$$R_{11} = -[(q_1 - k_1)(q_2 + k_2) - (q_1 - q_2)(k_1 + k_2) \sin^2 \alpha] / N_0, \quad ,$$

$$\begin{aligned}
R_{12} &= -2k_1(q_1 - q_2) \sin \alpha \cos \alpha / N_o \\
T_{11} &= 2k_1(q_2 + k_2) \cos \alpha / N_o , \\
T_{12} &= -2k_1(q_1 + k_2) \sin \alpha / N_o \\
N_o &= (q_1 + k_1)(q_2 + k_2) + (q_1 - q_2)(k_1 - k_2) \sin^2 \alpha .
\end{aligned} \tag{3.8}$$

Mit Hilfe der Stromdichten

$$j = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* (\nabla \Psi) - (\nabla \Psi^*) \Psi) \tag{3.9}$$

in den betreffenden Kanälen ist es möglich, die Wahrscheinlichkeiten $P_{1,2}^r$ für die Reflexion zurück in die diabatischen Kanäle im Bereich $x > 0$ und $P_{1,2}^t$ für die Transmission in die adiabtischen Kanäle im Bereich $x < 0$ zu bestimmen:

$$P_1^r = |R_{11}|^2 , \quad P_2^r = \frac{k_2}{k_1} |R_{12}|^2 , \quad P_1^t = \frac{q_1}{k_1} |T_{11}|^2 , \quad P_2^t = \frac{q_2}{k_1} |T_{12}|^2 . \tag{3.10}$$

Für den Fall, daß die Kopplung verschwindet ($v_{12} = 0$, $\alpha = 0$, $q_1 = \sqrt{(k_1)^2 + v_{11}}$), erhalten wir die Resultate des Einkanalproblems (siehe Gleichung (1.36)):

$$R_{11} = \frac{k_1 - q_1}{k_1 + q_1} , \quad T_{11} = \frac{2k_1}{k_1 + q_1} , \quad P_1^t = \frac{4k_1 q_1}{(k_1 + q_1)^2} , \quad R_{12} = T_{12} = 0 . \tag{3.11}$$

Nahe der Schwelle ($k \rightarrow 0$) haben wir deshalb in diesem Fall auch das gleiche lineare Verhalten wie im Einkanalfall

$$-R_{11} \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} 1 - 2bk , \quad |R_{11}|^2 \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} 1 - 4bk , \quad T_{11} \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} 2bk , \quad P_1^t \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} 4bk , \tag{3.12}$$

und der Längenparameter $b = \frac{1}{\sqrt{v_{11}}}$ ist identisch.

Sind nun für $x > 0$ und/oder $x < 0$ nicht alle Kanäle offen, dann müssen die entsprechenden oszillierenden Wellen durch evaneszente Wellen ersetzt werden, die asymptotisch abfallen und nicht zur Reflexion oder Transmission beitragen. Die dann gültigen Reflexions- und Transmissionsamplituden, können aus Gleichung (3.8) mit den nötigen Ersetzungen hergeleitet werden. Ist $k^2 < \varepsilon_2$, dann kann keine Reflexion in den oberen diabatischen Kanal stattfinden und die diabatische Wellenfunktion ist für $x > 0$

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ik_1 x} + R_{11} e^{ik_1 x} \\ C e^{-\kappa x} \end{pmatrix} \quad \text{für } x > 0 , \quad \text{mit } \begin{pmatrix} k_1 \\ \kappa \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k \\ \sqrt{\varepsilon_2 - k^2} \end{pmatrix} , \tag{3.13}$$

weshalb in Gleichung (3.8) k_2 durch $i\kappa$ ersetzt werden muß. Wenn nun $k^2 < -w_{22}$ ist, dann kann in dem oberen adiabatischen Kanal keine Transmission mehr stattfinden und die Wellenfunktion dort ist

$$\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} e^{-iq_1 x} \\ D e^{\gamma_2 x} \end{pmatrix} \quad \text{für } x < 0 \quad , \quad \text{mit} \quad \begin{pmatrix} q_1 \\ \gamma_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{k^2 + w_{11}} \\ \sqrt{-w_{22} - k^2} \end{pmatrix} . \quad (3.14)$$

Um dem Rechnung zu tragen, wurde in Gleichung (3.8) q_2 durch $i\gamma_2$ ersetzt. Wie man an den vorherigen Formeln sieht, werden die physikalischen Eigenschaften des Zweikanalsystems durch die vier reduzierten Energien v_{11} , v_{22} , v_{12} und ε_2 sowie die reduzierte Gesamtenergie k^2 eindeutig bestimmt. Die adiabatischen Energien w_{11} und w_{22} wie auch der Mischungswinkel α sind durch die drei diabatischen Energien v_{ij} definiert und umgekehrt. Da das Potential keine Längenskala besitzt, bleiben durch eine uniforme Reskalierung der Energien die physikalischen Eigenschaften des Systems unverändert. Deshalb können wir oBdA für den weiteren Verlauf eine der Energien konstant lassen. So soll in allen quantitativen Beispielen, in denen die Reflexionskanäle nicht entartet sind, ε_2 gleich Eins sein.

3.2 Ein offener Reflexionskanal, $k^2 < \varepsilon_2$

In diesem Fall haben wir $k_2 = i\kappa$ mit κ aus Gleichung (3.13). Ist nun die diabatische Kopplung so stark, daß $w_{22} < 0$ ist und, zugleich $k^2 < -w_{22}$ ist, dann ist $q_2 = i\gamma_2$, mit γ_2 aus Gleichung (3.14). Im Limes kleiner Energien, $k_1 = k \rightarrow 0$, können die Wellenzahlen κ , q_1 und q_2 (oder γ_2) durch ihre Schwellenwerte ersetzt werden:

$$q_{10} = \sqrt{w_{11}} \quad , \quad q_{20} = \sqrt{w_{22}} \quad (\text{oder } \gamma_{20} = \sqrt{-w_{22}} \quad , \quad \text{wenn } w_{22} < 0) \quad \text{und} \quad \kappa_0 = \sqrt{\varepsilon_2} . \quad (3.15)$$

Der Fehler, der dadurch gemacht wird, ist von der Ordnung k^2 . Ob nun der obere Transmissionskanal an der Schwelle ($k = 0$) offen ist oder nicht, hängt von der Stärke der Kopplung v_{12} (siehe Gleichung (3.4)) ab. Für $v_{12} \leq \sqrt{v_{11}v_{22}}$ ist der Kanal offen und für $v_{12} > \sqrt{v_{11}v_{22}}$ geschlossen. Das schwellennahe Verhalten der Reflexionsamplitude erhält man aus Gleichung (3.8):

$$-R_{11} \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} 1 - 2k\Omega \quad , \quad (3.16)$$

mit

$$\begin{aligned} \Omega &= \frac{q_{10} \sin^2 \alpha + i\kappa_0 + q_{20} \cos^2 \alpha}{q_{10}q_{20} + i\kappa_0(q_{10} \cos^2 \alpha + q_{20} \sin^2 \alpha)} \quad \text{für } v_{12} \leq \sqrt{v_{11}v_{22}} \quad , \\ \Omega &= \frac{q_{10} \sin^2 \alpha + i(\kappa_0 + \gamma_{20} \cos^2 \alpha)}{-\kappa_0\gamma_{20} \sin^2 \alpha + iq_{10}(\gamma_{20} + \kappa_0 \cos^2 \alpha)} \quad \text{für } v_{12} \geq \sqrt{v_{11}v_{22}} \quad . \quad (3.17) \end{aligned}$$

Die Reflektivität nahe der Schwelle verhält sich somit wie

$$|R_{11}| \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} |1 - 2k\Omega| = 1 - 2k\Re(\Omega) + O(k^2) \quad (3.18)$$

und entspricht somit dem Schwellenverhalten des Einkanalproblems (1.31). Der Längenparameter b , der das lineare Verhalten bestimmt, ist

$$b = \Re(\Omega) \quad . \quad (3.19)$$

Im Spezialfall $v_{12} = \sqrt{v_{11}v_{22}}$, gilt $q_{20} = \gamma_{20} = 0$ und die beiden Ausdrücke in Gleichung (3.17) sind identisch und somit ist

$$b = \Re(\Omega) = \frac{1}{q_{10} \cos^2 \alpha} = \frac{1}{\cos^2 \alpha} \frac{1}{\sqrt{v_{11} + v_{22}}} \quad , \quad (3.20)$$

was unabhängig von der Schwelle ε_2 für die inelastische Reflexion ist.

Das Niedrigenergieverhalten der Transmissionsamplituden in Gleichung (3.8) ist

$$T_{11} \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} kt_{10} \quad , \quad T_{22} \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} kt_{20} \quad , \quad (3.21)$$

wobei die energieunabhängigen Parameter t_{10} und t_{20} durch

$$\begin{aligned} t_{10} &= \frac{2(q_{20} + i\kappa_0) \cos \alpha}{q_{10}q_{20} + i\kappa_0(q_{10} \cos^2 \alpha + q_{20} \sin^2 \alpha)} \quad , \\ t_{20} &= -\frac{2(q_{10} + i\kappa_0) \sin \alpha}{q_{10}q_{20} + i\kappa_0(q_{10} \cos^2 \alpha + q_{20} \sin^2 \alpha)} \quad \text{für } v_{12} \leq \sqrt{v_{11}v_{22}} \quad , \end{aligned} \quad (3.22)$$

und durch

$$t_{10} = \frac{2i(\gamma_{20} + \kappa_0) \cos \alpha}{-\kappa_0 \gamma_{20} \sin^2 \alpha + iq_{10}(\gamma_{20} + \kappa_0 \cos^2 \alpha)} \quad \text{für } v_{12} > \sqrt{v_{11}v_{22}} \quad (3.23)$$

gegeben sind. Das schwelennahe Verhalten der dazugehörigen Transmissionswahrscheinlichkeiten (3.10) ist in führender Ordnung

$$P_1^t \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} |t_{10}|^2 q_{10} k \quad , \quad P_2^t \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} |t_{20}|^2 q_{20} k \quad , \quad (3.24)$$

wobei der Ausdruck für P_2^t nur dann gültig ist, wenn $v_{12} \leq \sqrt{v_{11}v_{22}}$, also der obere adiabatische Kanal an der Schwelle offen für Transmission ist. Da die Stromdichte erhalten bleibt, müssen sich die Wahrscheinlichkeiten für Reflexion und Transmission zu Eins addieren und somit gilt:

$$\begin{aligned} 4\Re(\Omega) &= q_{10}|t_{10}|^2 + q_{20}|t_{20}|^2 \quad \text{für } v_{12} \leq \sqrt{v_{11}v_{22}} \quad , \\ 4\Re(\Omega) &= q_{10}|t_{10}|^2 \quad \text{für } v_{12} > \sqrt{v_{11}v_{22}} \quad . \end{aligned} \quad (3.25)$$

Wenn $v_{12} = \sqrt{v_{11}v_{22}}$ ist, dann ist die Wellenzahl q_2 im oberen Transmissionskanal gleich der einlaufenden Wellenlänge k , da $w_{22} = 0$ ist und die Transmissionswahrscheinlichkeit verhält sich nun wie

$$P_2^t \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} |t_{20}|^2 k^2 \quad (3.26)$$

im schwelennahen Bereich. Dies ist quadratisch in k , und in 1. Ordnung in k gilt:

$$P_2^t \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} 0, \quad P_1^t \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} |t_{10}|^2 q_{10} k = \frac{4k}{q_{10} \cos^2 \alpha} \quad (3.27)$$

Obiges Ergebnis ist in Übereinstimmung mit der Reflexionswahrscheinlichkeit $|R_{11}|^2 = 1 - 4kb$ und dem Längenparameter b aus Gleichung (3.20).

In Abbildung 3.3 zeigen wir den Längenparameter b aus Gleichung (3.19) als Funktion der Kopplungsstärke v_{12} für $v_{11} = 4.5$ und zwei verschiedene Stufentiefen $v_{22} = 2.0$ und $v_{22} = 6.0$. Anfangs führt das Erhöhen der Kopplungsstärke zu einem

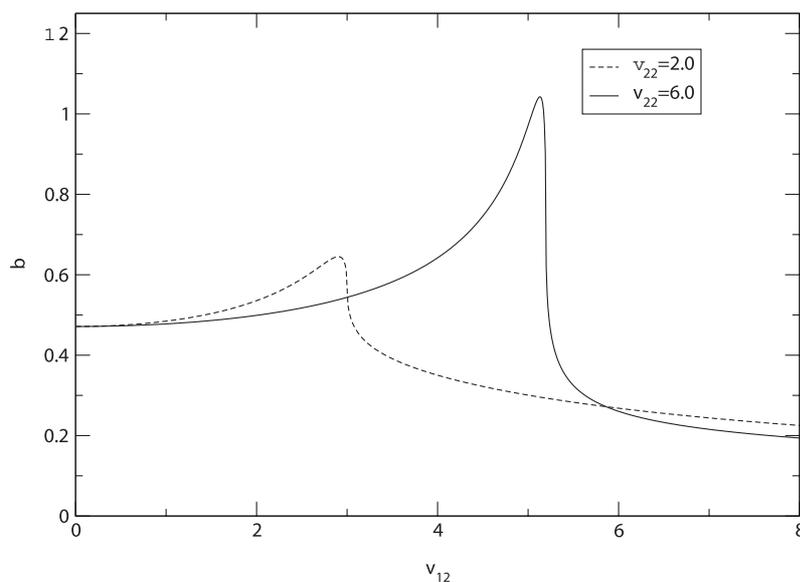


ABBILDUNG 3.3: Der Längenparameter b aus Gleichung (3.19), der das schwelennahe Verhalten der Reflektivität nach Gleichung (3.18) bestimmt, als Funktion der Kopplungsstärke v_{12} für den Wert $v_{11} = 4.5$. Die gestrichelte Linie entspricht $v_{22} = 2.0$ und die durchgezogene Linie $v_{22} = 6.0$. Die Schwelle für inelastische Reflexion ist $\varepsilon_2 = 1.0$. Aus [30].

ansteigenden b -Wert, was einer abnehmenden Reflexionswahrscheinlichkeit nahe der

Schwelle entspricht. Der Grund hierfür liegt darin, daß nun zusätzlich die Transmission in den zweiten adiabatischen Kanal möglich ist, da der Mischungswinkel α von Null auf größere Werte ansteigt, siehe Gleichung (3.2). Bei einem Wert der Kopplungsstärke nahe bei (aber nicht exakt bei) $\sqrt{v_{11}v_{22}}$ erhält man ein ausgeprägtes Maximum von b . Steigt die Kopplungsstärke weiterhin an, dann nimmt der b -Wert sehr schnell ab. Der Fall $v_{12} = \sqrt{v_{11}v_{22}}$ nimmt eine besondere Rolle ein, da bei diesem Wert das obere adiabatische Potential w_{22} exakt Null wird. Das bedeutet, daß die Projektion der einlaufenden Welle auf diesen adiabatischen Kanal sich als freie Welle dort ausbreitet. Ist nun $v_{12} > \sqrt{v_{11}v_{22}}$, dann verschwindet an der Schwelle die Wahrscheinlichkeit, in den adiabatischen Kanal transmittiert zu werden nach Gleichung (3.26) wie $O(k^2)$, und somit kann dieser Kanal keinen linearen Beitrag zur Reflektivität liefern. Das gleiche gilt für den Fall $v_{12} < \sqrt{v_{11}v_{22}}$, wo P_2^t für einen endlichen Energiebereich oberhalb der Schwelle verschwindet. Nimmt v_{12} grössere Werte als $\sqrt{v_{11}v_{22}}$ an, dann bleibt der obere adiabatische Kanal für die Transmission an der Schwelle geschlossen und der untere Kanal wird eine immer tiefere Stufe, für die der (Einkanal-)Längenparameter b immer kleiner wird (siehe Gleichung (1.37)). Dies trägt zum steilen Abfall von b bei.

Das ausgeprägte Maximum des Längenparameters b entspricht einem ausgeprägtem Minimum der Reflektivität in Schwellennähe. Dies wird in Abbildung 3.4 deutlich. Dort haben wir die Reflexionswahrscheinlichkeit als Funktion der Kopplungsstärke v_{12} bei einer reduzierten Energie $k^2 = 0.3$ und einem diabatischen Kanal $v_{11} = 4.5$ für zwei verschiedene Werte von v_{22} , nämlich $v_{22} = 2.0$ (gestrichelte Linie) und $v_{22} = 6.0$ (durchgezogene Linie), aufgetragen. Zusammenfassend kann man sagen, daß auch im Fall der Kanalkopplung das Verhalten der Reflektivität nahe der Schwelle linear in k bleibt und die Wahrscheinlichkeit an der Schwelle den Wert eins hat. Der lineare Abfall wird durch die Anwesenheit eines zweiten offenen Transmissionskanals verstärkt, sprich die Reflexionswahrscheinlichkeit an der Schwelle reduziert, aber der lineare Abfall wird stark unterdrückt (also die Reflexionswahrscheinlichkeit erhöht), wenn der zweite Transmissionskanal geschlossen ist.

3.3 Zwei offene Reflexionskanäle, $k^2 \geq \varepsilon_2$

Kann nun das Teilchen auch in den oberen diabatischen Kanal inelastisch reflektiert werden, dann können wir mit Hilfe von Gleichung (3.8) die Amplituden für die Reflexion und Transmission bestimmen. Im Gegensatz zu vorher sind nun beide Wellenzahlen k_1 und k_2 reell und positiv. Im Limes hoher Energien, $k_1 = k \rightarrow \infty$,

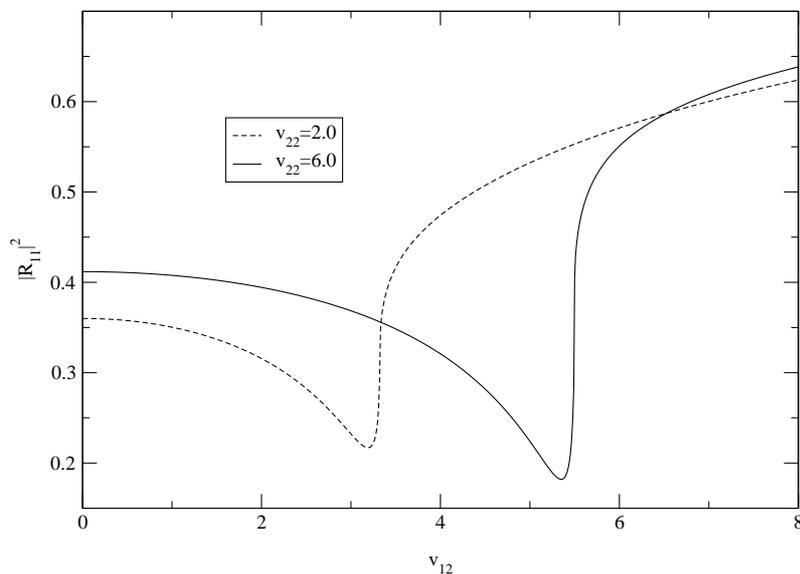


ABBILDUNG 3.4: Reflexionswahrscheinlichkeit $|R_{11}|^2$ als Funktion der Kopplungsstärke v_{12} für $k^2 = 0.3$, $\varepsilon_2 = 1$, $v_{11} = 4.5$ und $v_{22} = 2$ (gestrichelte Linie) und $v_{22} = 6$ (durchgezogene Linie). Aus [30].

werden die Wellenzahlen zu:

$$k_2 = \sqrt{k^2 - \varepsilon_2} \stackrel{k \rightarrow \infty}{\sim} k - \frac{\varepsilon_2}{2k}, \quad q_{1,2} = \sqrt{k^2 + w_{11,22}} \stackrel{k \rightarrow \infty}{\sim} k - \frac{w_{11,22}}{2k}. \quad (3.28)$$

Die eckige Klammer im Ausdruck für $|R_{11}|$ in Gleichung (3.8) vereinfacht sich dann zu

$$(q_1 - k)(q_2 + k_2) - (q_1 - q_2)(k + k_2) \sin^2 \alpha \quad (3.29)$$

$$\stackrel{k \rightarrow \infty}{\sim} w_{11} - (w_{11} - w_{22}) \sin^2 \alpha$$

$$= w_{11} \cos^2 \alpha + w_{22} \sin^2 \alpha$$

$$= v_{11}. \quad (3.30)$$

Für hohe Energien wird somit die Reflexionsamplitude im elastischen Kanal zu

$$R_{11} \stackrel{k \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{v_{11}}{4k^2}. \quad (3.31)$$

Dies entspricht dem Ergebnis für den Einkanalfall (1.40). Somit beeinflusst die Kanalkopplung für hohe Energien nicht die Reflexion in den elastischen Kanal. Sie darf

aber trotzdem dort nicht vernachlässigt werden, denn für die Reflexionsamplitude in den oberen diabatischen Kanal gilt

$$R_{12} \stackrel{k \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{(w_{11} - w_{22}) \sin \alpha \cos \alpha}{4k^2} = -\frac{v_{12}}{4k^2} \quad , \quad (3.32)$$

und diese ist somit von gleicher Ordnung wie R_{11} .

Die Reflektivität eines Stufenpotentials ist im Einkanalfall eine monoton abfallende Funktion der Wellenzahl k , die an der Schwelle den Wert Eins aufweist und dann bei unendlichen Energien bis auf Null abfällt. Ist nun auf Grund der Kanalkopplung ein zweiter Kanal vorhanden, dann ist die Reflektivität $|R_{11}|$ kleiner als im ungekoppelten Fall, da es nun für das Teilchen zusätzlich möglich ist, in den zweiten adiabatischen Kanal transmittiert oder in den oberen diabatischen Kanal reflektiert zu werden. Der Ausdruck für $|R_{11}|$ ist, wie man an Gleichung (3.8) sieht, reell, wenn $k^2 > -w_{22}$ ist, da dann auch q_2 reell ist. Unter bestimmten Umständen kann $|R_{11}|$ Null werden, was dazu führt, daß die Wahrscheinlichkeit, in den elastischen Kanal reflektiert zu werden, verschwindet. Die Bedingung für eine Nullstelle von $|R_{11}|$ lautet:

$$\sin^2 \alpha = \frac{(q_1 - k)(q_2 + k_2)}{(q_1 - q_2)(k + k_2)} \quad . \quad (3.33)$$

Nenner und Zähler in Gleichung (3.33) haben eine identische Struktur, nur, daß k und q_2 vertauscht sind. Sei nun $k^2 > -w_{22}$ und somit q_2 reell. Da die linke Seite von Gleichung (3.33) nur Werte zwischen Null und Eins annimmt, muß der Nenner größer als der Zähler sein. Somit muß $q_2 < k$ sein, was nur dann eintritt, wenn $w_{22} < 0$ ist, also der obere adiabatische Kanal repulsiv ist. Betrachten wir nun den Fall, daß w_{22} negativ und zudem $w_{22} < \varepsilon_2$ ist. Im Limes großer Energien verhält sich die rechteckige Klammer im Ausdruck für $|R_{11}|$ in Gleichung (3.8) wie in Formel (3.30) und ist damit immer größer als Null. Für Energien bis zur Schwelle ε_2 für inelastische Reflexion, an der $k_2 = 0$ gilt, bleibt R_{11} reell. Wird nun die eckige Klammer in Gleichung (3.8) negativ an dieser Schwelle, das bedeutet $(q_1 - q_2)k \sin^2 \alpha > (q_1 - k)q_2$, dann muß R_{11} im Bereich $k^2 > \varepsilon_2$ eine Nullstelle besitzen. Somit ist

$$\frac{\sqrt{\varepsilon_2 + w_{11}} - \sqrt{\varepsilon_2}}{\sqrt{\varepsilon_2 + w_{11}} + \sqrt{\varepsilon_2 + w_{22}}} \frac{\sqrt{\varepsilon_2 + w_{22}}}{\sqrt{\varepsilon_2}} < \sin^2 \alpha \quad (3.34)$$

eine hinreichende Bedingung für diese Nullstelle. Da beide Quotienten auf der linken Seite von Ungleichung (3.34) kleiner als Eins sind, wenn w_{22} negativ ist, kann die Bedingung für genügend große Werte des Mischungswinkels α erfüllt werden. Nähert sich die Transmissionsschwelle $-w_{22}$ der inelastischen Reflexionsschwelle ε_2 an, dann verschwindet der zweite Quotient auf der linken Seite und die Bedingung (3.34) ist

immer erfüllt. Ist $-w_{22}$ größer als ε_2 , dann ist R_{11} nur für Energien bis $-w_{22}$, dort gilt $q_2 = 0$, reell. Die eckige Klammer im Ausdruck für R_{11} in Gleichung (3.8) wird negativ für $k = \sqrt{-w_{22}}$, $q_2 = 0$, wenn

$$\frac{\sqrt{-w_{22}}}{\sqrt{-w_{22}} + \sqrt{-w_{22} - \varepsilon_2}} \frac{\sqrt{-w_{22} + w_{11}} - \sqrt{-w_{22}}}{\sqrt{-w_{22} + w_{11}}} < \sin^2 \alpha \quad . \quad (3.35)$$

Wiederum sind die beiden Quotienten in Ungleichung (3.35) kleiner als Eins und somit kann die Bedingung für genügend große Werte des Mischungswinkels erfüllt werden.

Die Abbildung 3.5 zeigt die Reflektivitäten $|R_{11}|$ (durchgezogene Linie) und $|R_{12}|$

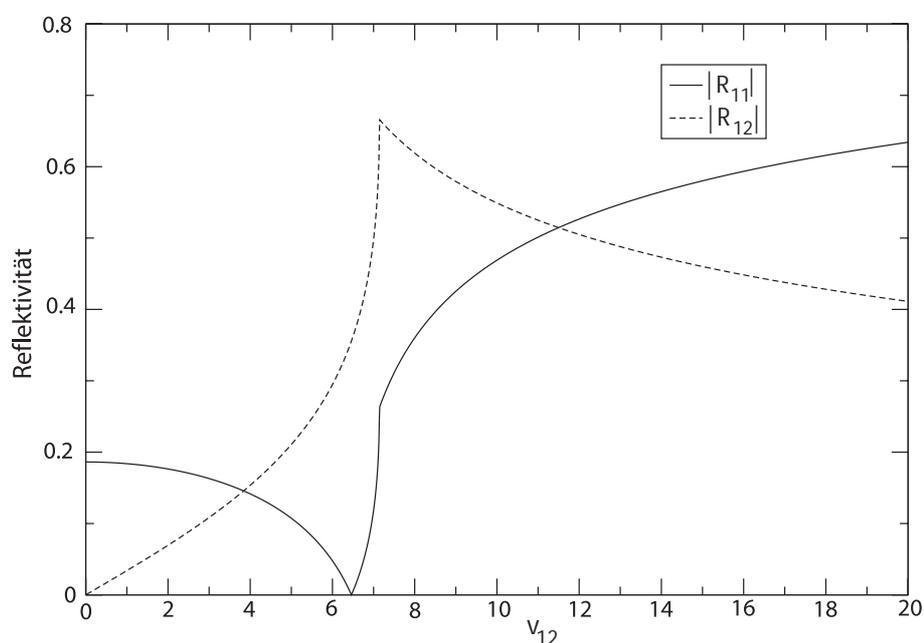


ABBILDUNG 3.5: Die Reflektivitäten $|R_{11}|$ (durchgezogene Linie) und $|R_{12}|$ (gestrichelte Linie) als Funktionen der Kopplungsstärke v_{12} für $v_{11} = 4.5$ und $v_{22} = 2.0$ mit der Energie $k^2 = 4.0$. Nach [30]

(gestrichelte Linie) als Funktionen der Kopplungsstärke v_{12} für $v_{11} = 4.5$ und $v_{22} = 2.0$ mit der Energie $k^2 = 4.0$. R_{11} hat dabei eine Nullstelle bei $v_{12} = 6.460$. Die Spitze von $|R_{12}|$ und die abgerundete Spitze von $|R_{12}|$ bei $v_{12} = 7.14$ sind Ausdruck dafür, daß bei diesem Wert der Kopplungsstärke die Transmissionschwelle $-w_{22}$ die Energie $k^2 = 4.0$ des Teilchens erreicht.

Das Auftreten von solchen Spitzen, bzw. abgerundeten Spitzen bei gewissen Schwel-

lenenergien ist wohlbekannt aus der Streutheorie. Dort tauchen sie z.B. in elastischen Streuamplituden und -querschnitten bei Energiewerten auf, die elastischen Anregungsschwellen entsprechen [19, 38]. Der Ursprung dieser Spitzen liegt in der Abhängigkeit der Amplituden von der Wurzel gewisser Größen, die bei den entsprechenden Schwellen verschwinden. R_{11} ist z.B. eine Funktion der Variablen $q_2 = \sqrt{k^2 + w_{22}(v_{11}, v_{22}, v_{12})}$. Wenn v_{12} den Wert v_0 annimmt, (unter den Voraussetzungen von Abbildung 3.5 ist $v_0 = 7.14$) verschwindet q_2 . Für Kopplungsstärken, die etwas schwächer als v_0 sind, liefert eine Taylor-Entwicklung der Wurzel das Verhalten in führender Ordnung in der Nähe der Schwelle:

$$q_2 \approx \sqrt{a_<(v_0 - v_{12})} \quad \text{und} \quad |R_{11}| = |R_{11}|_{q_2=0} + A_<\sqrt{v_0 - v_{12}} \quad . \quad (3.36)$$

Die Konstante $A_<$ hängt vom Wert der Ableitung von R_{11} nach v_{12} ab. Ein ähnlicher Ausdruck kann auch für Kopplungsstärken größer als v_0 aufgestellt werden, wobei der Ausgangspunkt dafür $\gamma_2 = \sqrt{-k^2 - w_{22}(v_{11}, v_{22}, v_{12})}$ ist. Man erhält dann für die Reflektivität

$$|R_{11}| = |R_{11}|_{\gamma_2=0} + A_>\sqrt{v_{12} - v_0} \quad , \quad (3.37)$$

mit einer anderen Konstanten $A_>$. Haben nun die beiden Konstanten $A_>$ und $A_<$ das gleiche Vorzeichen, dann hat $|R_{11}|$ bei dem Wert v_0 der Kopplungsstärke ein Maximum oder ein Minimum, das spitz ist, bei unterschiedlichen Vorzeichen der Konstanten hat $|R_{11}|$ aber eine abgerundete Spitze. Diese Spitzen und abgerundeten Spitzen tauchen aber — ähnlich den Singularitäten bei der Streuung — auch auf, wenn wir die Amplituden oder Wahrscheinlichkeiten als Funktionen anderer Variablen auftragen, z.B. der Wellenzahl k .

In Abbildung 3.6 haben wir die Reflektivität $|R_{11}|$ im elastischen Kanal als Funktion der einkommenden Wellenzahl k für verschiedene Werte der Kopplungsstärke v_{12} aufgetragen. Die Tiefen der diagonalen (diabatischen) Potentiale in dieser Abbildung sind $v_{11} = 4.5$ und $v_{22} = 2.0$. Damit ist der Wert der Kopplungsstärke, bei der der obere Transmissionskanal repulsiv wird und somit die Transmissionsschwelle positiv wird, $\sqrt{v_{11}v_{22}} = 3$. Für $v_{12} = 2.9$ (gepunktete Linie) ist die Reflektivität im wesentlichen eine monoton abnehmende Funktion, die eine kleine Spitze bei $k = 1$ aufweist, die von der Schwelle für inelastische Reflexion herrührt. Bei der Kopplungsstärke $v_{12} = 3.1$ (strichgepunktete Linie) zeigt $|R_{11}|$ zusätzlich noch eine abgerundete Spitze bei der Transmissionsschwelle, die bei $k^2 = -w_{22} = 0.0925$ ($k = 0.304$) liegt. Für $v_{12} = 4.0$ (gestrichelte Linie) ist die Transmissionsschwelle zum Wert 0.94 ($k = 0.97$) hochgewandert, mit einer deutlichen Spitze der Reflektivität an dieser Stelle. Die Schwelle für inelastische Reflexion ($k = 1$) erscheint schwach als abgerundete Spitze und man findet jetzt eine Nullstelle der Reflektivität bei $k = 1.033$. Ist nun

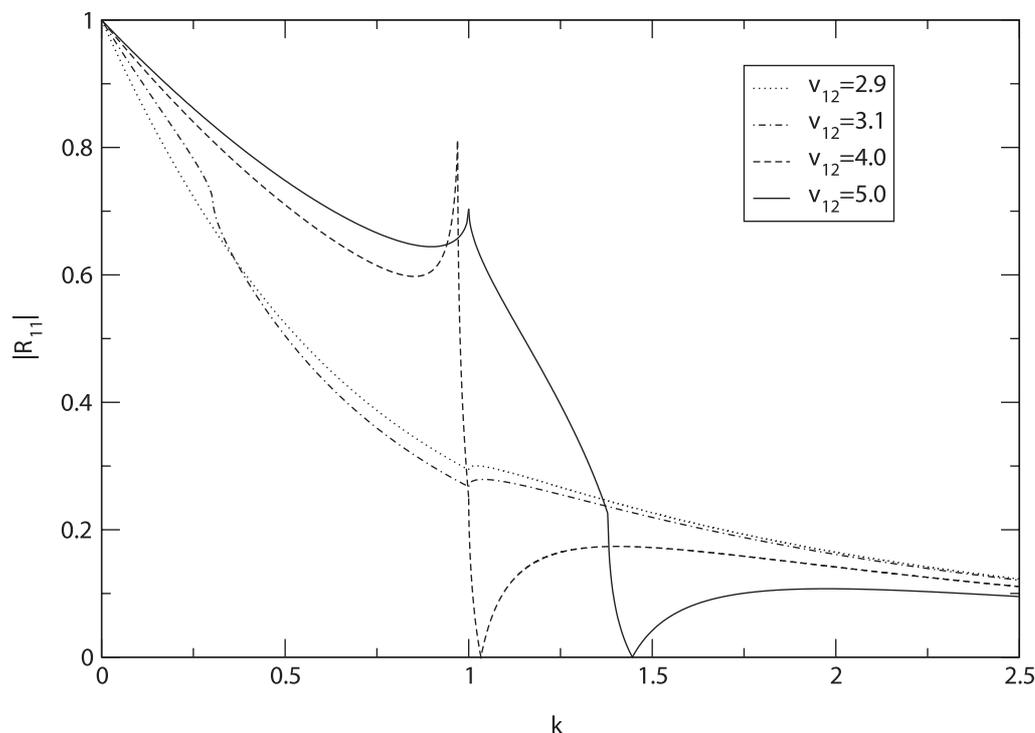


ABBILDUNG 3.6: Die Reflektivitäten $|R_{11}|$ im elastischen Kanal als Funktion der Wellenzahl k für verschiedene Werte der Kopplungsstärke v_{12} . Die Tiefen der diagonalen (diabatischen) Potentiale sind $v_{11} = 4.5$, $v_{22} = 2.0$ und die Schwelle für die inelastische Reflexion ist $\varepsilon_2 = 1.0$. Aus [30].

$v_{12} = 5.0$ (durchgezogene Linie), dann befindet sich die Transmissionsschwelle bei $-w_{22} = 1.90$ ($k = 1.38$) und zeigt sich dort als abgerundete Spitze. Die inelastische Reflexionsschwelle taucht als deutliche Spitze auf und die Nullstelle von $|R_{11}|$ befindet sich nun bei $k = 1.446$.

Das Vorhandensein einer exakten Nullstelle von R_{11} ist physikalisch sehr wichtig, denn es bedeutet, daß die Reflexion ausschließlich in den inelastischen Kanal erfolgt. Somit kann, unter den geeigneten Randbedingungen, die Quantenreflexion dazu führen, daß es zu einem kompletten Transfer des inneren Freiheitsgrades des Teilchens von seinem Grundzustand in den angeregten Zustand kommt. Die Reflexionswahrscheinlichkeit in den oberen (inelastischen) diabatischen Kanal $P_2^r = (k_2/k)|R_{12}|^2$ verschwindet bei der Schwelle ε_2 , wo $k_2 = 0$ ist. An dieser Schwelle ist die reflektierte Welle eine Produktwellenfunktion aus der räumlichen Bewegung und dem inneren Freiheitsgrad in seinem Grundzustand. Bei der Nullstelle von R_{11} ist die reflektierte Welle eine Produktwellenfunktion mit dem inneren Freiheitsgrad

im angeregten Zustand. Für Energien, die zwischen der Schwelle und der Nullstelle liegen, sind die räumliche Bewegung und der innere Freiheitsgrad miteinander verschränkt, wobei der Grad der Verschränkung von der Energie des einlaufenden Teilchens abhängt. Somit kann man über die Quantenreflexion eine Verschränkung von Zuständen erzeugen und den Grad über die Energie des Teilchens steuern.

In Abbildung 3.7 zeigen wir die Reflexionswahrscheinlichkeiten P_1^r und P_2^r und die Gesamtwahrscheinlichkeit $P_1^r + P_2^r$ als Funktionen der Wellenzahl k des einlaufenden Teilchens. Die deutliche Spitze von P_1^r bei der inelastischen Schwelle ($k = 1$) wird durch die schnell anwachsende inelastische Reflexionswahrscheinlichkeit mehr als kompensiert, so daß die Gesamtwahrscheinlichkeit an dieser Stelle eine abgerundete Spitze aufweist. Die stufenartige Spitze bei $k = 1.38$ kommt von der Transmissionsschwelle $-w_{22}$. Die Nullstelle von $|R_{11}|$, die bei dem Graphen für $|R_{11}|$ zu einer Spitze führt, liefert bei $P_1^r = |R_{11}|^2$, auf Grund des Quadrierens, einen glatten Verlauf. Zudem macht die Nullstelle auch bei der Gesamtwahrscheinlichkeit nicht durch einen besonderen Kurvenverlauf auf sich aufmerksam. Vergleicht man nun das Ergebnis mit dem Fall eines ungekoppelten Stufenpotentials (siehe Abbildung 3.7 (b)), dann sieht man, daß die Kanalkopplung die Reflexionswahrscheinlichkeit im gesamten Bereich bis zu $k = 1.5$ erhöht. Sogar im Bereich $k < 1.0$ ist die Wahrscheinlichkeit erhöht, obwohl für diesen Energiebereich nur Reflexion in den elastischen Kanal möglich ist. Das stimmt mit dem Ergebnis aus Abschnitt 3.2 für das Niedrigenergieverhalten überein, wo wir herausgefunden haben, daß durch einen zweiten Kanal, der für die Transmission geschlossen ist, die Reflexionswahrscheinlichkeit erhöht wird.

3.4 Entartete Reflexionskanäle

Ein besonderer Fall tritt ein, wenn die beiden diabatischen Kanäle entartet sind, sprich die Reflexionsschwellen identisch sind, also $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$. Dann gilt $k_2 = k_1 = k$ und die Gleichung (3.8) vereinfacht sich zu:

$$\begin{aligned} R_{11} &= -\frac{q_1 - k}{q_1 + k} + \frac{2k(q_1 - q_2) \sin^2 \alpha}{(q_1 + k)(q_2 + k)} \quad , \\ R_{12} &= -\frac{2k(q_1 - q_2) \sin \alpha \cos \alpha}{(q_1 + k)(q_2 + k)} \\ T_{11} &= \frac{2k \cos \alpha}{(q_1 + k)} \quad , \quad T_{12} = -\frac{2k \sin \alpha}{(q_2 + k)} \quad \text{für} \quad k^2 \geq -w_{22} \end{aligned} \quad (3.38)$$

und zu

$$\begin{aligned} R_{11} &= -\frac{(q_1 - k)}{(q_1 + k)} + \frac{2k(q_1 - i\gamma_2) \sin^2 \alpha}{(q_1 + k)(i\gamma_2 + k)} , \\ R_{12} &= -\frac{2k(q_1 - i\gamma_2) \sin \alpha \cos \alpha}{(k + q_1)(i\gamma_2 + k)} , \quad T_{11} = \frac{2k \cos \alpha}{(q_1 + k)} \quad \text{für } k^2 < -w_{22} \end{aligned} \quad (3.39)$$

Nahe der Schwelle erhält man für das Verhalten der Beträge der Reflexions- und Transmissionsamplituden in führender Ordnung:

$$\begin{aligned} |R_{11}| &\stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} 1 - 2k \left(\frac{\cos^2 \alpha}{q_{10}} + \frac{\sin^2 \alpha}{q_{20}} \right) , \\ |R_{12}| &\stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} 2k \sin \alpha \cos \alpha \left(\frac{1}{q_{20}} - \frac{1}{q_{10}} \right) , \\ |T_{11}| &\stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{2k \cos \alpha}{q_{10}} , \quad |T_{12}| \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{2k \sin \alpha}{q_{20}} \quad \text{für } k^2 > -w_{22} \end{aligned} \quad (3.40)$$

und

$$\begin{aligned} |R_{11}| &\stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} 1 - \frac{2k \cos^2 \alpha}{q_{10}} , \\ |R_{12}| &\stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} 2k \sin \alpha \cos \alpha \left(\frac{1}{q_{10}} + \frac{1}{\gamma_{20}} \right) , \\ |T_{11}| &\stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{2k \cos \alpha}{q_{10}} \quad \text{für } k^2 < -w_{22} . \end{aligned} \quad (3.41)$$

In obigen Gleichungen stehen $q_{i0} = \sqrt{w_{ii}}$, $i = 1, 2$ (oder $\gamma_{20} = \sqrt{-w_{22}}$) für die Schwellenwerte von q_1 und q_2 (oder γ_2). Im Gegensatz zum nichtentarteten Fall (siehe Gleichungen (3.16) und (3.17), die $|R_{11}|$ im Grenzfall $k \rightarrow 0$ bestimmen) geben nun die Niedrigenergieausdrücke für $|R_{11}|$ und $|R_{12}|$ in den Gleichungen (3.40) und (3.41) kein sinnvolles Grenzverhalten für $q_{20} \rightarrow 0$ oder $\gamma_{20} \rightarrow 0$ wieder. Ist die Transmissionsschwelle $-w_{22}$ nahe bei Null, dann nehmen q_{20} oder γ_{20} kleine Werte an und der mit ihnen verbundene Längenparameter, der den linearen Abfall der Reflektivität nahe der Schwelle bestimmt, divergiert. Daher sind die Gleichungen (3.40) und (3.41), die $|R_{11}|$ und $|R_{12}|$ für kleine Energien beschreiben, nur für einen entsprechend kleinen Wertebereich von k gültig.

Ist nun $v_{12} = \sqrt{v_{11}v_{22}}$, d.h. die Kopplung ist so eingestellt, daß die Kopplung im oberen adiabatischen Kanal verschwindet ($w_{22} = 0$), dann tritt eine besondere Situation ein. Das schwelennahe Verhalten wird dann zu

$$|R_{11}| \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \left(1 - 2\frac{k}{q_{10}} \right) \cos^2 \alpha , \quad |R_{12}| \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \left(1 - 2\frac{k}{q_{10}} \right) \sin \alpha \cos \alpha ,$$

$$|T_{11}| \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{2k}{q_{10}} \cos \alpha, \quad |T_{12}| = \sin \alpha \quad . \quad (3.42)$$

Um dieses Ergebnis zu verstehen, muß man berücksichtigen, daß eine Mischung der Kanäle für $x > 0$ keine Kopplung in der Schrödinger-Gleichung bewirkt. Die Diagonalisierung gemäß Gleichung (2.2) führt zu zwei ungekoppelten Gleichungen, eine für ϕ_1 und eine für ϕ_2 . Diese sind dann im ganzen Wertebereich $-\infty < x < +\infty$ entkoppelt und die Gleichung für ϕ_2 entspricht der eines freien Teilchens, das gar nicht reflektiert wird. Der einlaufende diabatische Kanal 1 kann in zwei adiabatische aufgeteilt werden; einen niedrigeren mit dem Gewicht $\cos(\alpha)$ und einen höheren mit dem Gewicht $\sin(\alpha)$, der unabhängig von der Energie ungehindert transmittiert wird. Der sich in Kanal 1 befindende Anteil hingegen unterliegt dem Einfluß der Quantenreflexion. Nahe der Schwelle ist der reflektierte Anteil des einlaufenden Stromes $(1 - 4k/q_{10}) \cos^2 \alpha$, und er wird mit dem Gewicht $\cos^2(\alpha)$ für den diabatischen Kanal 1 und mit dem Gewicht $\sin^2(\alpha)$ für den Kanal 2 zwischen beiden aufgeteilt. Für im Bereich $x > 0$ entartete Kanäle führt der spezielle Kopplungswert $v_{12} = \sqrt{v_{11} v_{22}}$ zu der einzigartigen und ungewöhnlichen Situation, daß die Quantenreflexion an der Schwelle nicht vollständig ist, da ein endlicher Anteil (nämlich $\sin^2(\alpha)$) des einlaufenden Stromes frei in den oberen adiabatischen Kanal transmittiert wird, und zwar unabhängig von der Energie. Dieser Effekt ist nicht auf scharfe Potentialstufen beschränkt, sondern tritt auch in ähnlichen Situationen bei glatten Potentialen auf, wenn alle Einträge der Potentialmatrix die gleiche Ortsabhängigkeit haben, wie in Gleichung (2.8).

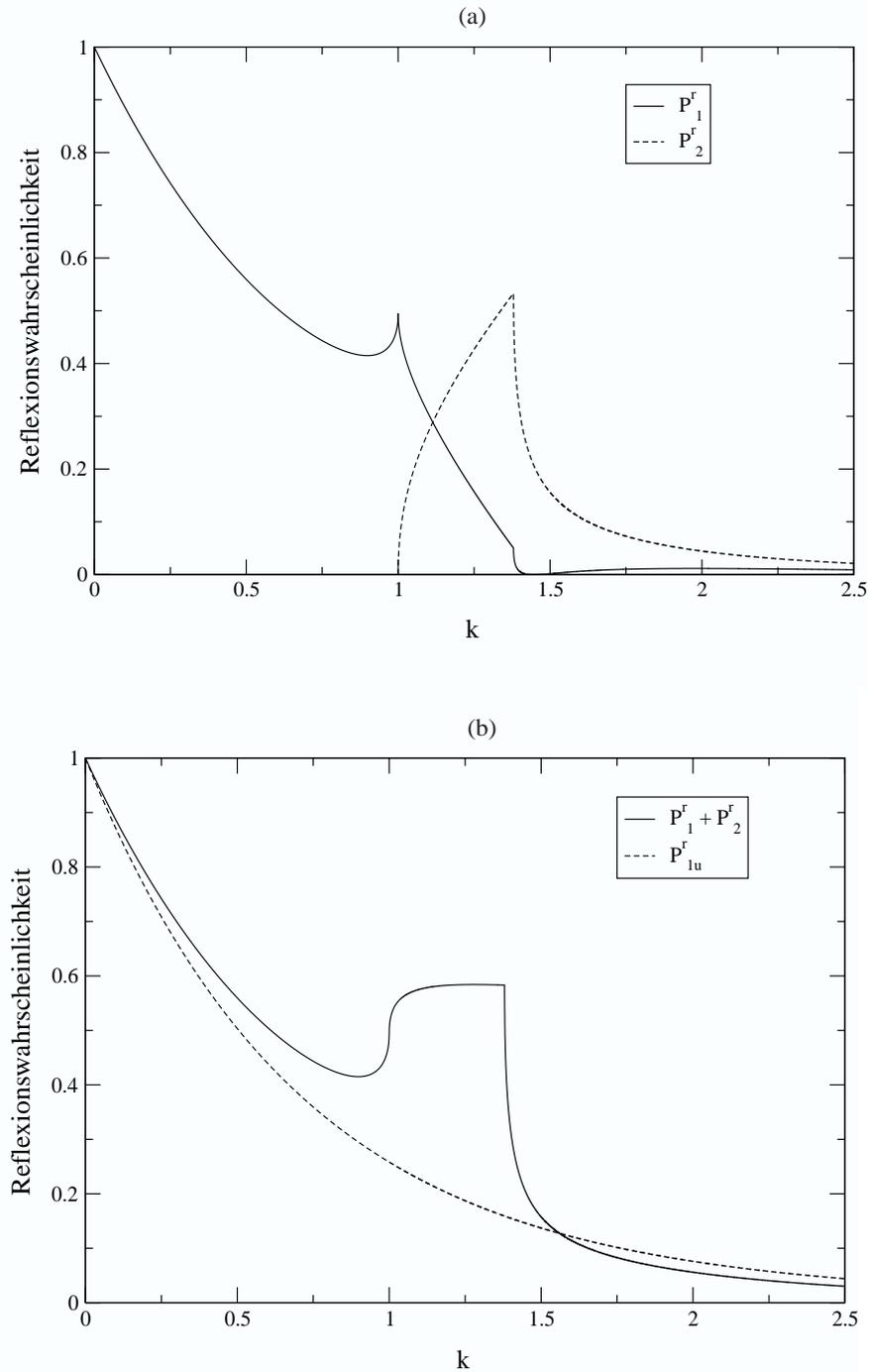


ABBILDUNG 3.7: Die Reflexionswahrscheinlichkeiten $P_1^r = |R_{11}|^2$ und $P_2^r = (k_2/k)|R_{12}|^2$ (a) und die Gesamtreflexionswahrscheinlichkeit $P_1^r + P_2^r$ (b) als Funktionen der Wellenzahl k des einlaufenden Teilchens für $v_{11} = 4.5$, $v_{22} = 2.0$, $v_{12} = 5.0$ und $\varepsilon_2 = 1$. Die gestrichelte Linie in Abbildung (b) zeigt zum Vergleich die Reflexionswahrscheinlichkeit für eine einzelne ungekoppelte Stufe der Tiefe $v_{11} = 4.5$. Nach [30].

KAPITEL 4

Gekoppelte weiche Potentiale

Im vorherigen Kapitel haben wir am Beispiel von gekoppelten Stufenpotentialen den Einfluß der Kanalkopplung auf die Quantenreflexion untersucht. Dabei haben wir etliche interessante Ergebnisse gefunden. So zeigte sich, daß im Normalfall die Reflektivität, auch bei Vorhandensein eines zweiten Kanals, an der Schwelle den Wert Eins annimmt und für niedrige Energien ein lineares Verhalten zeigt. Nur wenn die diabatischen Kanäle entartet sind und die Kopplung gleich der Wurzel aus dem Produkt der diabatischen Stufentiefen ist, findet an der Schwelle keine vollständige Reflexion statt. Zudem kann bei einer wohldefinierten Energie, Reflexion nur in den inelastischen Kanal stattfinden.

In diesem Kapitel wollen wir anhand von weichen Potentialen untersuchen, ob sich die vorherigen Ergebnisse qualitativ verändern, wenn die diabatischen Potentiale stetig sind und somit die Badlandsfunktion (1.12) nicht nur an einem Punkt lokalisiert ist.

4.1 Woods-Saxon-Potentiale

Es bietet sich nun an, die Studie mit einem Modell zu beginnen, bei dem die Einträge der Potentialmatrix Woods-Saxon-Potentiale sind:

$$\mathbf{V}_{ij}(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{\tilde{v}_{ij}}{1 + e^{a_{ij}x}} + \delta_{ij}\varepsilon_i \right) . \quad (4.1)$$

Im Limes $a_{ij} \rightarrow \infty$ geht $\mathbf{V}_{ij}(x)$ über in

$$\mathbf{V}_{ij}(x) \stackrel{a_{ij} \rightarrow \infty}{\approx} \frac{\hbar^2}{2m} \begin{cases} -\tilde{v}_{ij} + \varepsilon_i \delta_{ij}, & x \leq 0 \\ \varepsilon_i \delta_{ij} , & x > 0 \end{cases} , \quad (4.2)$$

welches den Stufenpotentialen (3.1) aus Kapitel 3 mit $v_{ij} = \tilde{v}_{ij} + \varepsilon_i \delta_{ij}$ entspricht. Somit ist zu erwarten, daß mit größer werdenden a_{ij} auch die Eigenschaften der Woods-Saxon-Potentiale mit denen der Stufenpotentiale übereinstimmen werden.

Im Einkanalfall ist

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{v_0}{1 + e^{ax}} \quad . \quad (4.3)$$

Die Schrödinger-Gleichung für dieses Potential kann analytisch mit Hilfe von Hypergeometrischen Reihen gelöst werden, somit erhält man für die Reflektivität [27]

$$|R| = \frac{\sinh\left(\frac{\pi}{a} \left(\sqrt{k^2 + v_0} - k\right)\right)}{\sinh\left(\frac{\pi}{a} \left(\sqrt{k^2 + v_0} + k\right)\right)}, \quad (4.4)$$

und der Längenparameter, der das Niedrigenergieverhalten bestimmt, ist

$$b = \frac{\pi}{a} \frac{1}{\tanh\left(\frac{\pi}{a} \sqrt{v_0}\right)} \quad . \quad (4.5)$$

Wie man leicht sehen kann, gehen die Gleichungen (4.4) und (4.5) für große Werte von a in die entsprechenden Ausdrücke (siehe Formeln (1.36) und (1.37)) für das ungekoppelte Stufenpotential (1.35) über.

In Abbildung 4.1 vergleichen wir die Reflektivität eines ungekoppelten Stufenpotentials (1.35) mit der von Woods-Saxon-Potentiale (4.3) mit verschiedenen Diffusitäten $1/a$. Wie erwartet nähert sich die Reflektivität der Woods-Saxon-Potentiale mit kleiner werdender Diffusität, also größerem a , der des Stufenpotentials an. Damit führt eine Aufweichung der Stufe zu einem Abnehmen der Quantenreflexion.

Die gekoppelte Schrödinger-Gleichung (2.1) für eine Potentialmatrix wie Gleichung (4.1) kann im allgemeinen nicht analytisch gelöst werden. Um einen Vergleich mit den Ergebnissen aus Kapitel 3 vornehmen zu können, konzentrieren wir uns auf den Fall, daß alle diabatischen Potentiale die gleiche Diffusität besitzen, also $a_{ij} = a$, $i, j = 1, 2$. Zudem soll wie vorher gelten:

$$\tilde{v}_{ij} \geq 0 \quad , \quad \varepsilon_2 \geq \varepsilon_1 = 0 \quad . \quad (4.6)$$

Numerische Rechnungen zeigen, daß auch hier die Reflektivität an der Schwelle gegen Eins¹ geht und für niedrige Energien ein lineares bzw. exponentielles Verhalten (siehe (1.31) bzw. (1.32)) aufweist. Somit können wir auch hier einen Längenparameter b definieren, der die Quantenreflexion nahe der Schwelle bestimmt. Wir

¹Dies gilt natürlich nicht für den Fall, daß die Kanäle entartet sind und $v_{12} = \sqrt{v_{11}v_{22}}$ ist. Im entarteten Fall kann Gleichung (2.1) mit dem Potential (4.1) mit Hilfe von hypergeometrischen Reihen analytisch gelöst werden.

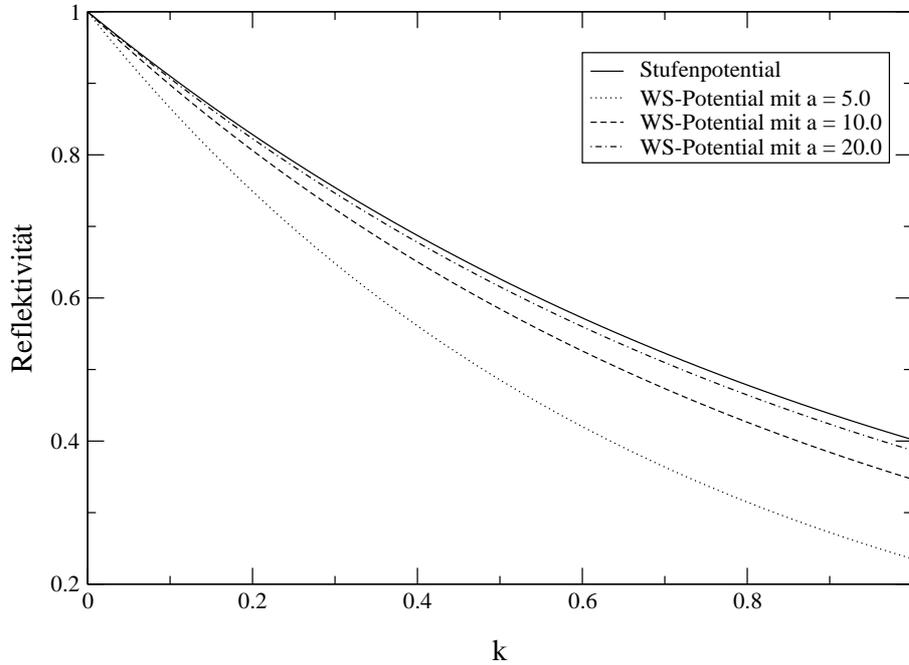


ABBILDUNG 4.1: Die Reflektivitäten eines Stufenpotentials (1.35) und von Woods-Saxon-Potentialen (4.3) mit verschiedenen Diffusitäten $1/a$ als Funktion der Wellenzahl k für $v_0 = 4.5$.

haben in Abbildung 4.2 für verschiedene Diffusitäten die b -Werte der gekoppelten Woods-Saxon-Potentiale (4.1) als Funktion der Kopplungsstärke $v_{12} = \tilde{v}_{12}$ numerisch berechnet und mit dem eines gekoppelten Stufenpotentials (3.1) verglichen. Die Parameter wurden so gewählt, daß sie mit denen in Abbildung 3.3 für die gestrichelte Linie verwendeten übereinstimmen. Wenn die Diffusität abnimmt, nähert sich der b -Wert für die Woods-Saxon-Potentiale dem des entsprechenden Stufenpotentials an. Je diffuser das Potential ist, desto größer wird b . Das führt dazu, daß die Quantenreflexion nahe der Schwelle geringer als beim Stufenpotential ist. Ebenso wie bei den Stufenpotentialen gibt es auch hier wieder ein ausgeprägtes Maximum von b . Im Einkanalfall haben wir ja schon anhand von Abbildung 4.1 gesehen, daß die Reflektivität der Woods-Saxon-Potentiale geringer ist als die des dazugehörigen Stufenpotentials. Aus Abbildung 4.2 können wir dies für R_{11} im Niedrigenergiebereich auch für den gekoppelten Fall sehen.

In den Abbildungen 4.3 (a-c) vergleichen wir die Reflektivität $|R_{11}|$ eines Stufenpo-

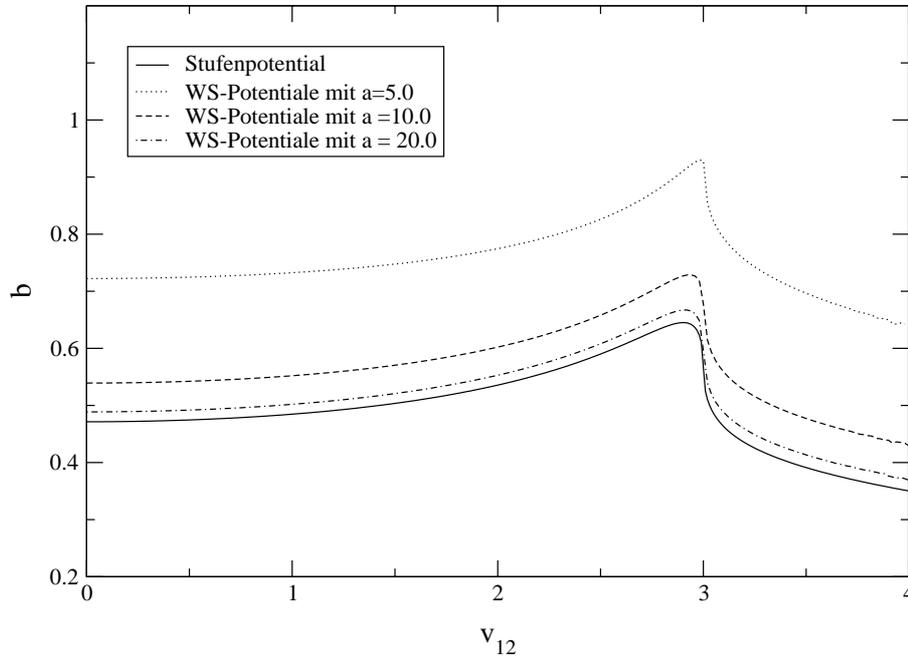


ABBILDUNG 4.2: Die Längenparameter b , die das Niedrigenergieverhalten der jeweiligen Reflektivitäten bestimmen, eines gekoppelten Stufenpotentials (3.1) und von Woods-Saxon-Potentiale (4.1) mit verschiedenen Diffusitäten $1/a$ als Funktion der Kopplungsstärke $v_{12} = \tilde{v}_{12}$ für $v_{11} = \tilde{v}_{11} = 4.5$, $v_{22} = \tilde{v}_{22} + \varepsilon_2 = 2.0$ und $\varepsilon_2 = 1.0$.

tentials mit der von gekoppelten Woods-Saxon-Potentiale unterschiedlicher Diffusität. Die Potentialparameter wurden so gewählt, daß sie denen aus Abbildung 3.6 mit der Kopplungsstärke $v_{12} = 4.0$ entsprechen. Für den Energiebereich zwischen der elastischen und inelastischen Reflexionsschwelle und für entsprechend große Energien ist die Reflexionswahrscheinlichkeit in den elastischen Kanal für die Woods-Saxon-Potentiale geringer. In der Nähe der Transmissionspitze (bei $k = 0.97$, siehe dazu Abbildung 4.3(c)) ist der Verlauf etwas verschieden und die Transmissionspitze ist noch stärker ausgeprägt als bei den gekoppelten Stufenpotentials.

Wie man an Abbildung 4.3(b) sieht, gibt es für R_{11} keine Nullstelle mehr, sondern nur noch ein globales Minimum, dessen Wert umso kleiner ist, je kleiner die Diffusität der Woods-Saxon-Potentiale ist. Auch wandert die Lage des Minimums mit zunehmenden Werten von a zu größeren Wellenzahlen hin. Der Grund dafür, daß es keine Nullstelle mehr gibt, liegt darin, daß die Reflektivität jetzt kein rein reeller

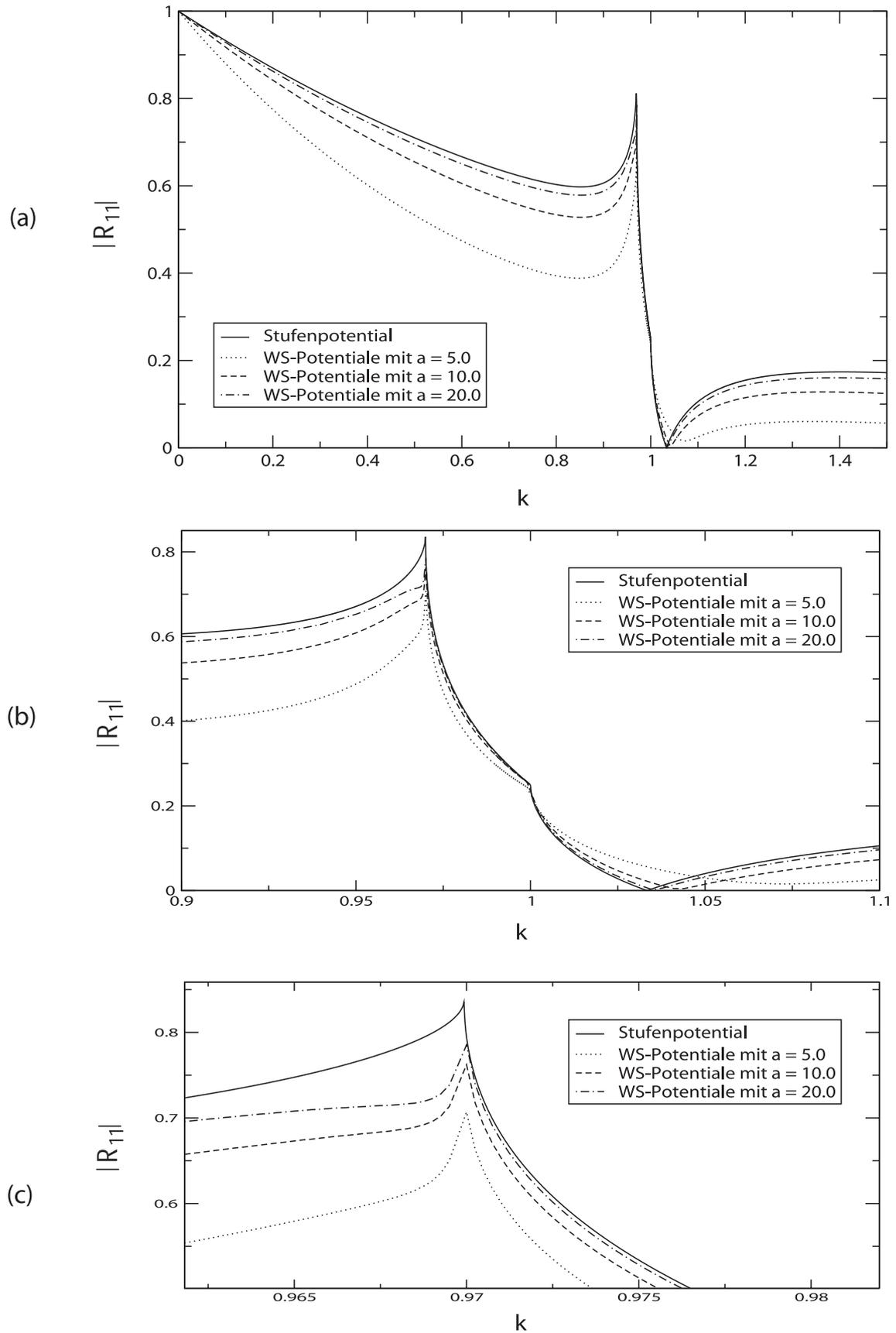


ABBILDUNG 4.3: Die Reflektivitäten R_{11} eines gekoppelten Stufenpotentials (3.1) und von Woods-Saxon-Potentialen (4.1) mit verschiedenen Diffusitäten $1/a$ als Funktion der Wellenzahl k für $v_{11} = \tilde{v}_{11} = 4.5$, $v_{22} = \tilde{v}_{22} + \varepsilon_2 = 2.0$, $v_{12} = \tilde{v}_{12} = 4.0$ und $\varepsilon_2 = 1.0$.

Ausdruck mehr ist, da die Wellenzahl nun überall ortsabhängig ist. Je diffuser die Stufe ist, desto größer ist auch der Imaginärteil von R_{11} . Da die Nullstellen von Real- und Imaginärteil normalerweise nicht übereinstimmen, hat der Betrag somit keine Nullstelle.

4.2 Evaneszente Wellen

Nachdem wir in den vorhergegangenen Abschnitten den Einfluß der Kanalkopplung auf die Quantenreflexion mit Hilfe von Modellpotentialen untersucht haben, wollen wir für die Betrachtungen dieses Teils der Arbeit einen realistischen Fall zu Grunde legen.

Ein Lichtstrahl der in einem Medium 1 unter einem Winkel α_1 (Einfallswinkel) auf die Grenzfläche zu einem Medium 2 trifft, bewegt sich dort unter einem Winkel α_2 (Brechungswinkel) fort (siehe dazu Abbildung 4.4), wobei für die Winkel die Beziehung

$$\frac{\sin(\alpha_1)}{\sin(\alpha_2)} = \frac{n_2}{n_1} \quad (4.7)$$

gilt. Dabei sind n_1 und n_2 die Brechungsindizes der beiden Medien. Ist Medium 2 nun

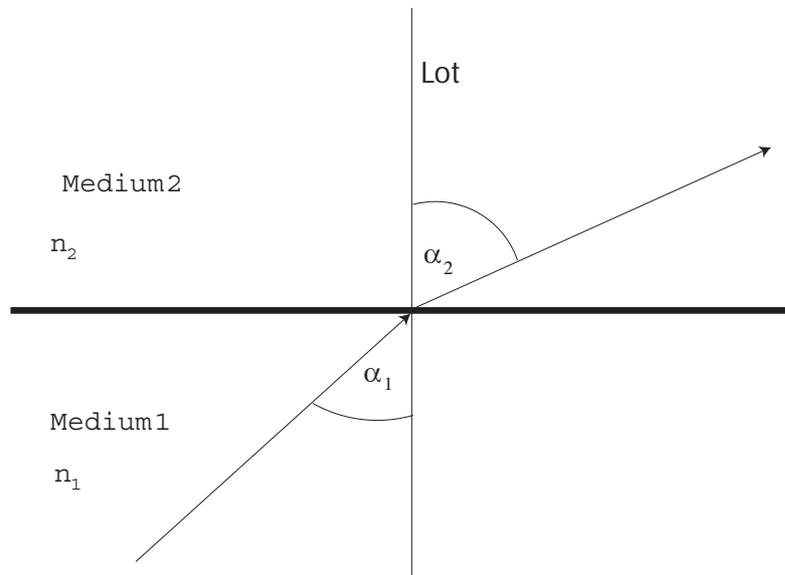


ABBILDUNG 4.4: Schematische Illustration des Brechungsgesetzes (4.7). n_1 und n_2 sind die Brechungsindizes der jeweiligen Medien, α_1 ist der Einfallswinkel und α_2 der Brechungswinkel des Lichtstrahls.

optisch dünner als Medium 1, dann kann der Einfallswinkel α_1 einen Grenzwinkel α_G nicht überschreiten, da der Sinus des Brechungswinkels maximal Eins werden kann. Fällt nun der Lichtstrahl unter einem grösserem Winkel als α_G ein, dann tritt an der Grenzfläche von Medium 1 zu Medium 2 Totalreflexion ein. In Medium 2 breitet sich dann eine sogenannte evaneszente Welle aus, die exponentiell abfällt (siehe dazu Abbildung 4.5). Für den Grenzwinkel gilt folgende Beziehung:

$$\sin(\alpha_G) = \frac{n_2}{n_1} \quad . \quad (4.8)$$

Cook und Hill haben 1982 [11] basierend auf diesem Phänomen vorgeschlagen, einen

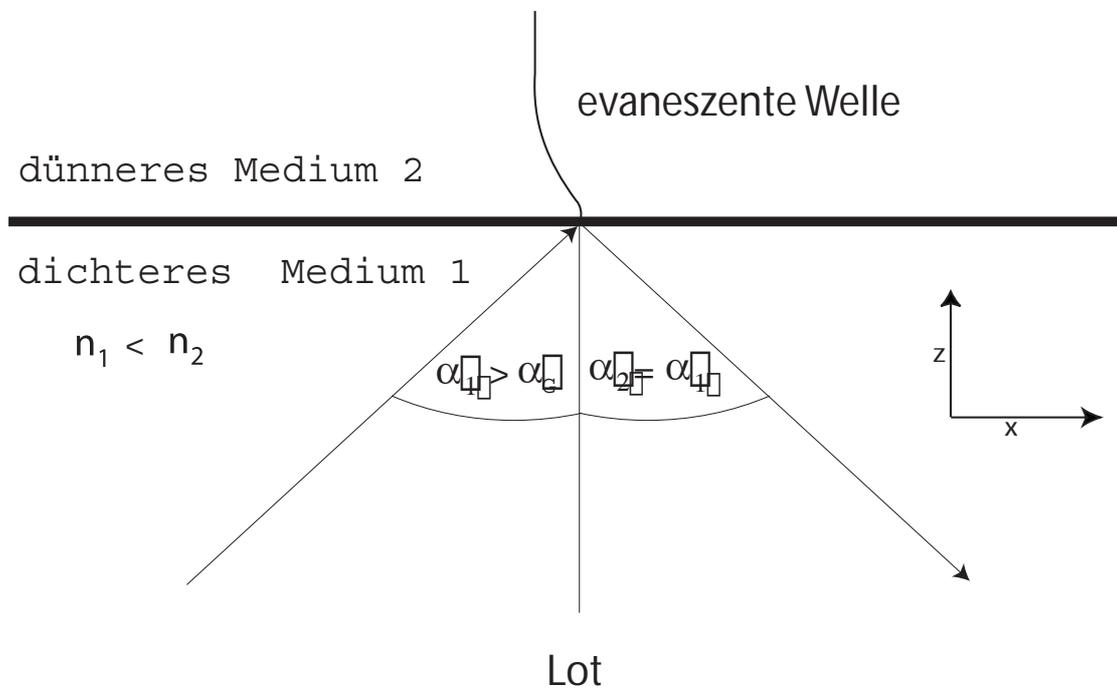


ABBILDUNG 4.5: Schematische Illustration der Totalreflexion. n_1 und n_2 sind die Brechungsindizes der jeweiligen Medien, α_1 ist der Einfallswinkel und α_2 der Brechungswinkel des Lichtstrahls. Bei der Totalreflexion gilt: $\alpha_1 = \alpha_2 > \alpha_G$.

Spiegel für neutrale Atome zu bauen, dabei sollte der Übergang von einem Dielektrikum zum Vakuum ausgenutzt werden. Wenn das einfallende Licht eine höhere Frequenz als die entsprechende natürliche Dipolfrequenz des Atoms hat, dann oszilliert der induzierte Dipol mit entgegengesetzter Phase zum Feld. Das Atom spürt

dann eine Kraft, die in Richtung des schwächer werdenden Feldes gerichtet ist. Somit ist das resultierende Potential repulsiv². Ist die Frequenz des Lichtes nun aber niedriger, dann schwingt der induzierte Dipol in Phase und wird in Richtung des stärker werdenden Feldes gezogen, was zu einem attraktiven Potential führt.

So ein Spiegel aus evaneszenten Wellen wurde 1987 von Balykin et al. [1, 2] experimentell realisiert. Mittlerweile gibt es sehr viele theoretische und experimentelle Arbeiten (siehe z.B. [3, 10, 13, 28, 48]), die sich mit diesem Thema beschäftigen und auch experimentelle Anwendungen des evaneszenten Wellen-Spiegels wurden entwickelt, wie z.B. der Einbau in ein atomares Interferometer durch Szriftgiser et al. [53].

In diesem Abschnitt wollen wir unsere Aufmerksamkeit auf die von Marani et al. [28] betrachtete experimentelle Situation fokussieren, die benutzt werden kann, um anhand von ^{87}Rb und metastabilen He Atom-Oberflächen-Wechselwirkungen zu untersuchen. Diese Atome haben eine Vielzahl von Grundzustandsunterniveaus, die unterschiedliche Potentiale im evaneszenten Feld spüren. Um diese Potentiale auflösen zu können, benötigt man induzierte Übergänge innerhalb der evaneszenten Welle. Dazu wird ein starker Laser, mit Frequenz ω_L , auf die Grenzfläche zwischen einem Prisma, mit Dielektrizitätskonstante ϵ , und dem Vakuum gestrahlt. Der Laser ist parallel zur Einfallsebene polarisiert (TM polarisiert) und bildet für Winkel, die nicht zu nah am Grenzwinkel α_G sind, eine evaneszente Welle, die bezogen auf die y -Achse fast σ^- -polarisiert ist. Die y -Achse ist dabei die Quantisierungsachse. Ein zweiter, schwächerer Laser mit einer Frequenz $\omega_L - \Delta\omega_L$ ist senkrecht zur Einfallsebene polarisiert (TE polarisiert) und bildet eine evaneszente Welle, die bezogen zur y -Achse π -polarisiert ist.

So wie elektrische Felder durch den Stark-Effekt und magnetische Felder durch den Zeeman-Effekt Energieverschiebungen hervorrufen, so beeinflussen auch Strahlungsfelder die atomare Niveaustuktur und erlauben es somit, einstellbare effektive Potentiale zu erzeugen. Ein Atom, das sich nun vom Vakuum auf das Prisma entlang der z -Achse zubewegt, spürt nun einerseits das effektive optische Potential V_{opt} , das durch die evaneszenten Wellen erzeugt wird und andererseits das Potential V_{ob} , das durch die Wechselwirkung des Atoms mit der Oberfläche des Prismas entsteht und attraktiv ist.

Nehmen wir der Einfachheit halber an, daß die σ^- -polarisierte Welle viel stärker als die π -polarisierte ist. Die σ^- -polarisierte Komponente der evaneszenten Welle hebt die magnetische Entartung der Grundzustandsunterniveaus auf und führt dazu, daß jedes Unterniveau ein unterschiedliches optisches Potential spürt. Durch

²Dieser Effekt wird für den Atomspiegel genutzt.

die π -polarisierte Welle werden über einen Raman-Übergang die atomaren Unterniveaus miteinander gekoppelt. Ist z.B. das Atom anfangs in einem magnetischen Unterniveau m_j und absorbiert ein σ^- -polarisiertes Photon, dann endet es durch stimulierte Emission eines π -Photons in einem Unterniveau $m_j - 1$. Dabei erhöht das Atom seine innere Energie um $\hbar\Delta\omega_L$. Der Übergang ist resonant, wenn die Differenz zwischen den magnetischen Niveaus $\hbar\Delta\omega_L$ ist.

Die optischen Potentiale, die durch die evaneszenten Wellen erzeugt werden, erhält man durch Lösen der optischen Bloch-Gleichungen mit der elektrischen Dipolapproximation (siehe z.B. [32]) als

$$V_{\text{opt}} = \frac{\hbar\delta}{2} \ln \left[1 + \frac{\Omega^2/2}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \right] e^{-2\kappa z} e^{-\rho^2} C_{mm'} \quad , \quad (4.9)$$

wobei $\delta = \omega_L - \vec{k}_L \vec{p} - \omega_0$ die Abweichung von der atomaren Resonanzfrequenz ω_0 und Γ die natürliche Linienbreite eines Atoms mit Impuls \vec{p} ist, das mit einem Photon der Wellenzahl \vec{k}_L und der Frequenz ω_L wechselwirkt. Für die Rabi-Frequenz Ω gilt:

$$\Omega^2 \approx I d^2 \quad , \quad (4.10)$$

dabei ist I die Intensität des Lasers und d ist das reduzierte Dipolmoment des Atoms. Die $C_{mm'}$ sind ein Produkt aus den Clebsch-Gordon-Koeffizienten³ und den elektrischen Feldamplituden an der Oberfläche bei $z = 0$ [28]

$$C_{mm'} = \sum_{q,q',m_a,J_a} E_q^*(0) E_{q'}^*(0) (J_g m; 1q | J_a m_a) (J_a m_a | J_g m'; 1q') \quad . \quad (4.11)$$

Die elektrischen Feldamplituden sind in der sphärischen Basis mit den Komponenten E_q , ($q = -1, 0, +1$) angegeben, J steht für den Gesamtdrehimpuls des Atoms, und der Index g (a) bezeichnet den Grundzustand (angeregten Zustand). Die inverse Eindringtiefe κ ergibt sich aus dem Einfallswinkel Θ durch

$$\kappa = k_L [(n \sin \Theta)^2 - 1]^{1/2} \quad , \quad (4.12)$$

mit dem Brechungsindex n des Prismas. Ist die Abweichung δ , wie in unserem Fall, groß gegen die Rabi-Frequenz und die natürliche Linienbreite, dann vereinfacht sich (4.9) zu

$$V_{\text{opt}} = \frac{\hbar\Omega^2}{\delta} e^{-2\kappa z} e^{-\rho^2} C_{mm'} \quad . \quad (4.13)$$

³Die Clebsch-Gordon-Koeffizienten tragen der Tatsache Rechnung, daß die optischen Potentiale verschiedene Zeeman-Niveaus miteinander koppeln, wenn das Laserfeld nicht in einem reinen Polarisationszustand ist.

Der Faktor $e^{-\rho^2}$ trägt dem Gauß'schen Profil des Lasers Rechnung⁴.

Die Wechselwirkung zwischen dem Atom und der Oberfläche des Prismas beschreibt das Casimir-van-der-Waals Potential V_{CvdW} [9]. Kennt man die komplexe, frequenzabhängige Dipolpolarisierbarkeit $\alpha_d(\omega)$ eines sphärisch-symmetrischen Grundzustandsatoms, dann erhält man für das Potential zwischen diesem und einer perfekt leitenden Oberfläche im Abstand z

$$V_{\text{CvdW}}^{(\infty)}(z) = \frac{-1}{4\pi\alpha_{\text{fs}} z^4} \int_0^\infty \alpha_d \left(\frac{i\xi}{\alpha_{\text{fs}} z} \right) e^{-2\xi} (2\xi^2 + 2\xi + 1) d\xi \quad , \quad (4.14)$$

mit der Feinstrukturkonstante $\alpha_{\text{fs}} = e^2/(\hbar c)$. Ist die Oberfläche dielektrisch, dann ist das Casimir-van-der-Waals Potential durch [28]

$$V_{\text{CvdW}}(z) = \frac{-\hbar}{8\pi^2 c^3} \int_0^\infty d\omega \omega^3 \alpha_d(\omega) \left(\int_0^1 dp + \int_0^{i\infty} dp \right) H(p, \epsilon) \exp(-2ip\omega z/c) \quad , \quad (4.15)$$

mit

$$H(p) = \frac{\sqrt{\epsilon - 1 + p^2} - p}{\sqrt{\epsilon - 1 + p^2} + p} + (1 - 2p^2) \frac{\sqrt{\epsilon - 1 + p^2} - p}{\sqrt{\epsilon - 1 + p^2} + p} \quad , \quad (4.16)$$

gegeben. Für kleine Abstände verhält sich (4.15) wie

$$V_{\text{CvdW}}(z) \stackrel{z \rightarrow 0}{\sim} -\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1} \frac{C_3}{z^3} \quad , \quad (4.17)$$

im Limes großer Abstände gilt hingegen

$$V_{\text{CvdW}}(z) \stackrel{z \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1} \frac{C_4}{z^4} \quad . \quad (4.18)$$

Die Potentialstärken, die das asymptotische Verhalten bestimmen, sind [29]

$$C_3 = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \alpha_d(i\omega) d\omega \quad , \quad C_4 = \frac{3}{8\pi} \frac{\alpha_d(0)}{\alpha_{\text{fs}}} = 16.36\alpha_d(0) \quad . \quad (4.19)$$

Friedrich et al. [20] haben für den Einkanalfall die Quantenreflexion bei Casimir-van-der-Waals Potentialen untersucht und gezeigt, unter welchen Bedingungen man den Einfluß der Retardierungseffekte erkennen kann. Diese wollen wir nun für die folgenden Rechnungen vernachlässigen und beschreiben die Wechselwirkung zwischen dem Atom und der Oberfläche durch das Van-der-Waals Potential

$$V_{\text{vdW}}(z) = -\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1} \frac{C_3}{z^3} \quad . \quad (4.20)$$

⁴Segev et al. [48] haben gezeigt, daß dieses Gauß'sche Profil wichtig für die Analyse der experimentellen Ergebnisse ist. Dies soll in unserer Betrachtung keine Rolle spielen, und so wollen wir annehmen, daß $\rho^2 = 0$ ist.

Parameter	Wert
λ	2046 a.u.
ϵ	3.49
n	1.87
Θ	53°
$\hbar\Delta\omega$	7.2567×10^{-10} a.u.
C_3	1.9092 a.u. [58]
C_{11}	-5×10^{-10} a.u.
C_{22}	-15×10^{-10} a.u.
C_{12}	1×10^{-10} a.u.

TABELLE 4.1: Werte für die Parameter, die für die Rechnungen für metastabiles Helium benutzt wurden. Es gilt dabei die Annahme, daß die σ^+ -Welle E_{+1} viel stärker als die π -Welle E_0 ist.

Somit ergibt sich für unsere Betrachtung folgende Potentialmatrix:

$$\begin{pmatrix} C_{11}e^{-2\kappa z} - \frac{\epsilon-1}{\epsilon+1} \frac{C_3}{z^3} & C_{12}e^{-2\kappa z} \\ C_{12}e^{-2\kappa z} & C_{22}e^{-2\kappa z} - \frac{\epsilon-1}{\epsilon+1} \frac{C_3}{z^3} + \hbar\Delta\omega \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

Die Parameter für die Rechnung haben wir in Anlehnung an die von Marani et al. [28] betrachtete Situation für metastabiles Helium gewählt (siehe Tabelle 4.1). Deren Augenmerk lag dabei darauf, Retardierungseffekte bei der Wechselwirkung zwischen Atomen und einer Oberfläche zu sehen. Dazu haben sie den Populations-transfer vom Grundzustand in den angeregten Zustand betrachtet. Daher wählten sie die Abweichung δ so, daß das optische Potential repulsiv wird, und man somit eine klassische Reflexion der Atome erhält.

Da wir uns in dieser Arbeit auf die Quantenreflexion konzentrieren wollen, haben wir δ so bestimmt, daß das optische Potential attraktiv ist, weshalb auch eine σ^+ -polarisierte Welle statt der σ^- -polarisierte Welle benutzt werden muß. Wie man an Tabelle 4.1 sieht, ist das Kopplungspotential sehr schwach im Vergleich zu den diagonalen Potentialen. Daher kann man keine großen Effekte bei der Reflektivität auf Grund der Kanalkopplung erwarten. Für die Bestimmung der Transmissionskoeffizienten und somit der Transmissionswahrscheinlichkeiten spielt die Kopplung jedoch eine wichtige Rolle, da sie auch bei einem niedrigen Wert einen Übergang in den zweiten Kanal ermöglicht (siehe dazu Abbildung 4.6), und sie darf deswegen nicht bei den Rechnungen vernachlässigt werden.

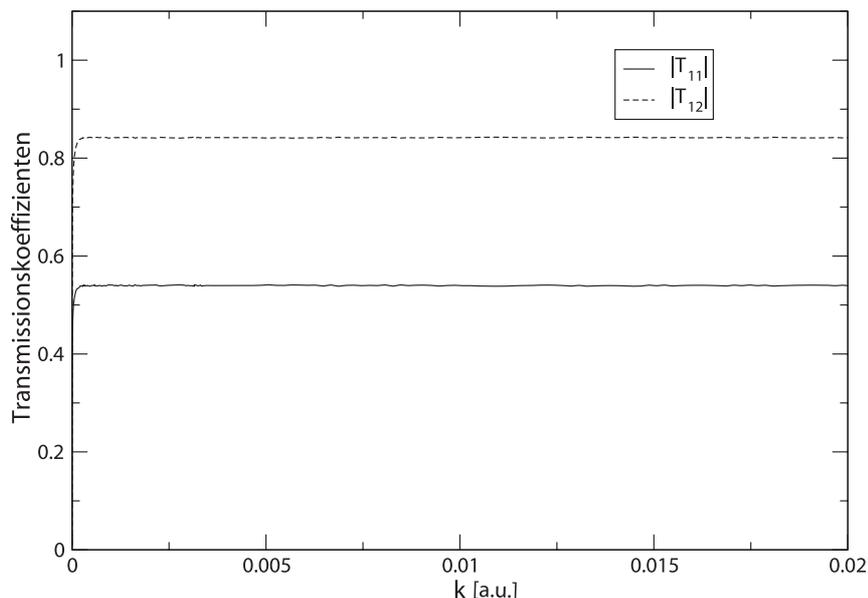


ABBILDUNG 4.6: Transmissionskoeffizienten $|T_{11}|$ und $|T_{12}|$ als Funktion der Wellenzahl k für die Potentialmatrix (4.21).

In Abbildung 4.7 haben wir nun die Reflektivität $|R_{11}|$ als Funktion der Wellenzahl k für die Potentialmatrix (4.21) dargestellt. Für die Berechnung der gestrichelten Linie haben wir in den diagonalen Potentialen die optischen Potentiale vernachlässigt, während wir sie in der Rechnung für die durchgezogene Linie berücksichtigt haben. Wie man sieht, müssen die optischen Potentiale in die Rechnung eingehen, obwohl sie im Vergleich zum Van-der-Waals-Potential sehr schwach sind (Der Unterschied in den Potentialstärken beträgt 10 Größenordnungen.), denn sonst erhält man bei niedrigen Energien ($k \leq 0.002$ a.u.) deutlich niedrigere Reflektivitäten. Ein Grund für ihre Wichtigkeit liegt darin, daß es ohne sie zu keinem curve crossing der beiden diagonalen Potentiale kommt. Außerdem berücksichtigt man den Beitrag der exponentiellen Funktionen zur Reflektivität nicht angemessen. Denn, wie wir aus den Betrachtungen des Einkanalfalls wissen (siehe Gleichung 1.34), ist nicht die Stärke des Potentials hier von Bedeutung, sondern der Faktor im Exponenten. Weiterhin kann man erkennen, daß auch hier die Reflektivität sich nahe an der Schwelle wie

$$|R_{11}| = 1 - 2bk \quad (4.22)$$

verhält, mit einem Wert von $b = 3.61 \times 10^7$ a.u. bzw. $b = 4.56 \times 10^7$ a.u. für den Fall, daß man die optischen Potentiale vernachlässigt. Somit bleibt auch in diesem Beispiel das lineare Verhalten, wie wir es aus dem Einkanalfall und den vorherigen

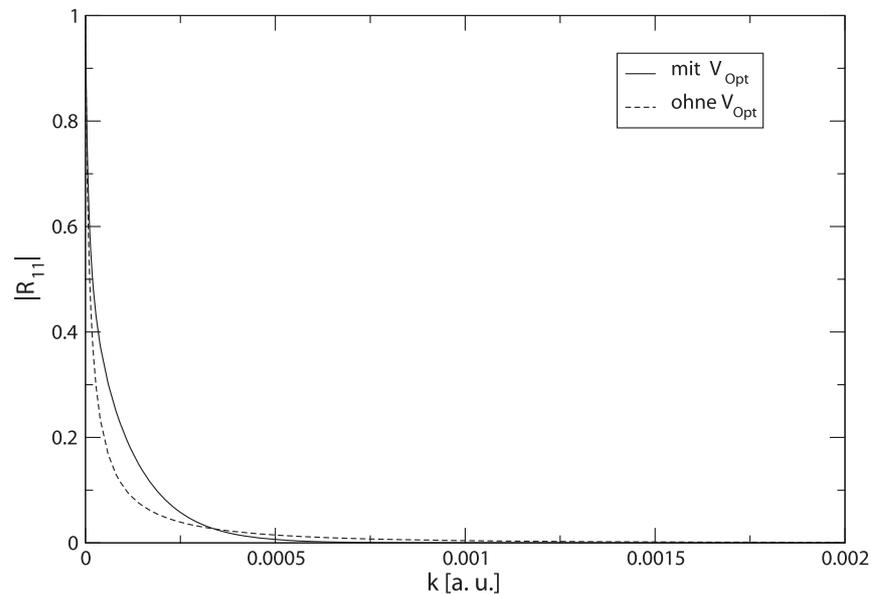


ABBILDUNG 4.7: Die Reflektivität $|R_{11}|$ als Funktion der Wellenzahl k für die Potentialmatrix (4.21). Die gestrichelte Linie ist das Ergebnis für den Fall, daß man die optischen Potentiale in den diagonalen Einträgen vernachlässigt.

Beispielen kennen, erhalten. Der Einfluß der Öffnung des zweiten Reflexionskanals kann hier nicht gesehen werden, da er erst bei höheren Wellenzahlen auftaucht ($k = 3.254 \times 10^{-3}$ a.u.), bei denen die Reflektivität bereits stark abgefallen ist.

KAPITEL 5

Nichtadiabatische Übergänge

Nachdem wir in den vorherigen Abschnitten unser Augenmerk auf die Reflektivität gerichtet haben, werden wir in diesem Teil der Arbeit den Einfluß der Quantenreflexion auf die nichtadiabatischen Übergangswahrscheinlichkeiten untersuchen. Dabei wollen wir unsere quantenmechanischen Resultate mit denen der Landau-Zener-Formel (1.49) vergleichen und deren Gültigkeit und Zuverlässigkeit bestimmen.

5.1 Woods-Saxon-Potentiale

Es bietet sich nun an, als erstes ein System zu betrachten, das aus zwei Woods-Saxon-Potentiale besteht, die durch eine Gauß'sche Glockenkurve miteinander gekoppelt sind (siehe dazu Abbildung 5.1). Im Unterschied zum Problem aus Abschnitt 4.1 haben wir jetzt eine lokalisierte Kopplung, und außerdem schneiden sich nun die diabatischen Kanäle im Gegensatz zu vorher. Somit hat unsere Potentialmatrix die Einträge:

$$V_{11}(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{v_{11}}{1 + e^{a_{11}x}} \right) , \quad (5.1)$$

$$V_{22}(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{v_{22}}{1 + e^{a_{22}x}} + \epsilon_2 \right) , \quad (5.2)$$

$$V_{12}(x) = \frac{\hbar^2}{2m} v_{12} e^{-a_{12}^2 (x-x_0)^2} , \quad (5.3)$$

dabei ist x_0 der Kreuzungspunkt der beiden diabatischen Kanäle. Die dazugehörigen adiabatischen Potentiale sind:

$$W_{11}(x) = \frac{V_{11}(x) + V_{22}(x)}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{(V_{11}(x) - V_{22}(x))^2 + |2V_{12}(x)|^2} ,$$

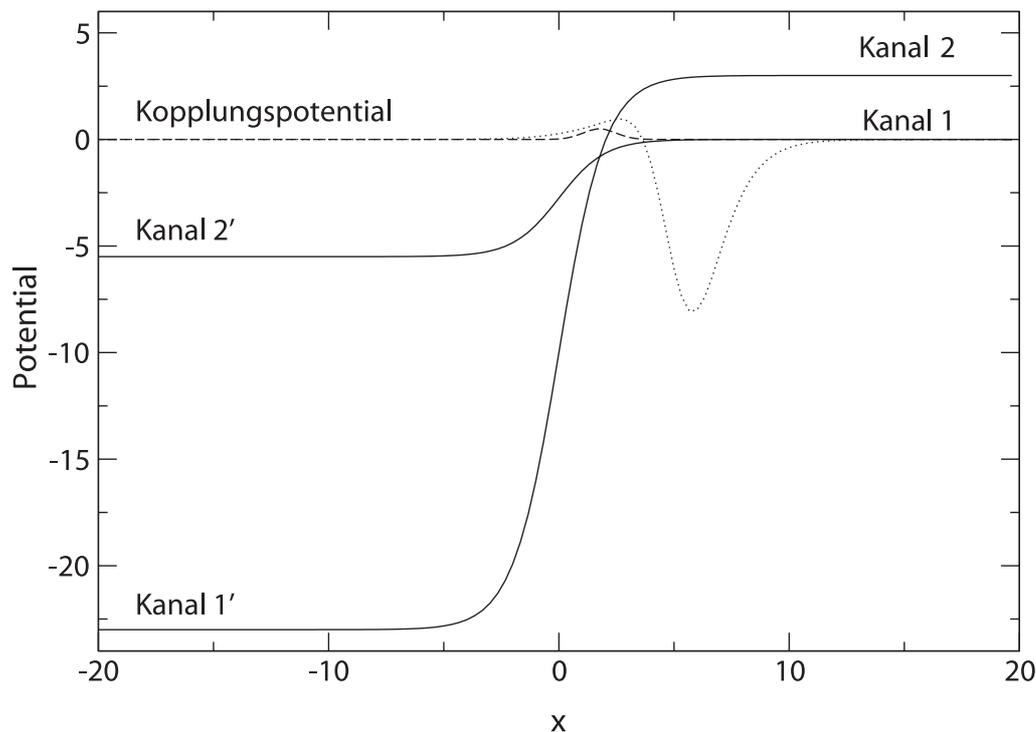


ABBILDUNG 5.1: Illustration der Woods-Saxon-Potentiale (5.1) und (5.2) und des Kopplungspotentials (5.3). Die gepunktete Linie repräsentiert die Badlandsfunktion (1.12) für $k = 0.2$. Die Parameter sind $v_{11} = 5.5$, $v_{22} = 26$, $\epsilon_2 = 3$, $a_{11} = a_{22} = a_{12} = 1$ und $v_{12} = 0.5$. Nach [31].

$$W_{22}(x) = \frac{V_{11}(x) + V_{22}(x)}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(V_{11}(x) - V_{22}(x))^2 + |2V_{12}(x)|^2} \quad .$$

Für große, positive Werte von x entspricht der adiabatische Kanal $W_{11}(x)$ dem diabatischen Kanal $V_{11}(x)$ (Kanal 1) und für große, negative Werte dem diabatischen Kanal $V_{22}(x)$ (Kanal 1'). Damit bewirkt die Kopplung ein Vertauschen der beiden Kanäle bei $x = -\infty$.

Abbildung 5.2 zeigt die numerisch bestimmte Wahrscheinlichkeit $P_{1 \rightarrow 1'}$, daß ein Teilchen, das im diabatischen Kanal 1 einläuft, in den adiabatischen Kanal 1' transmittiert wird, als Funktion der Weite $\frac{1}{a_{12}}$ des Kopplungspotentials. Es gilt als allgemein akzeptiert, daß der Übergang von einer Kurve zur anderen in einem Gebiet um den Kreuzungspunkt stattfindet, wo die Differenz zwischen den adiabatischen Energien nicht viel größer ist als die Kopplung. Diese wird durch die Beobachtung bekräftigt, daß für $a_{12} \rightarrow 0$, $P_{1 \rightarrow 1'}$ schnell gegen einen Maximalwert konvergiert und von a_{12} unabhängig ist, wenn diese nicht allzu große Werte annimmt. Für große

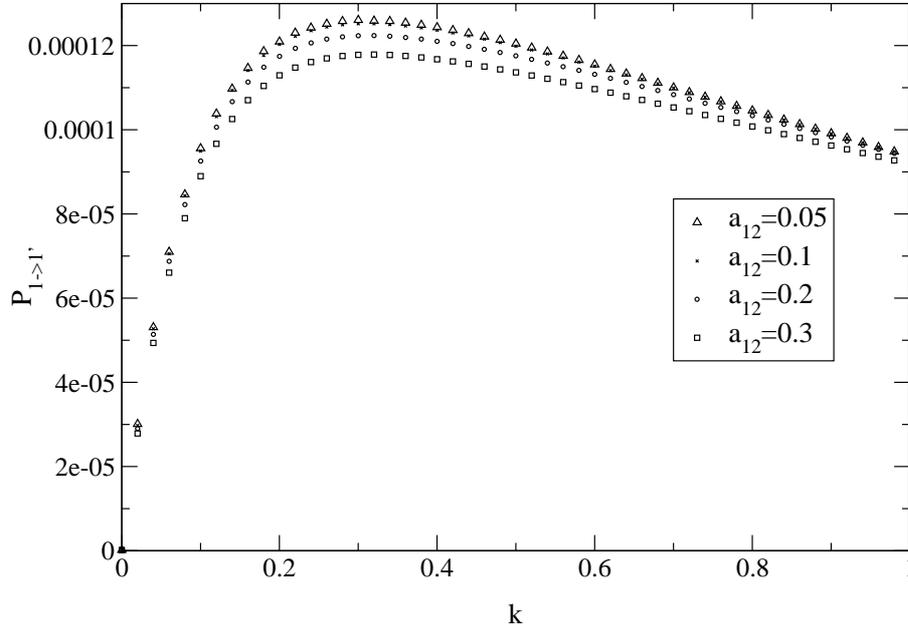


ABBILDUNG 5.2: Die numerisch bestimmte Transmissionswahrscheinlichkeit $P_{1 \rightarrow 1'}$ für verschiedene Werte von a_{12} als eine Funktion der Wellenzahl k . Die Parameter sind $v_{11} = 5.5$, $v_{22} = 26$, $\epsilon_2 = 3$, $a_{11} = a_{22} = 1$ und $v_{12} = 0.01$. Aus [31].

a_{12} ist der Übergangsbereich durch das schmale Kopplungspotential limitiert, was die Transmissionswahrscheinlichkeit reduziert. Die Landau-Zener-Formel für diesen Übergang ist

$$(P_{1 \rightarrow 1'})_{LZ} = 1 - \exp\left(-\frac{2\pi V_{12}(x_0)^2}{\hbar v |\Delta F|}\right) \quad . \quad (5.4)$$

Ihr liegt die Annahme zu Grunde, daß die Potentiale linear in der Umgebung des Kreuzungspunktes sind und die Kopplung konstant ist. Wenn wir die Potentialparameter so wählen, daß x_0 in dem Bereich liegt, wo $V_{11}(x)$ beinahe konstant ist und die Transmissionswahrscheinlichkeit unabhängig von a_{12} ist, sollten die Voraussetzungen für die Anwendbarkeit der Landau-Zener-Formel gegeben sein, zumindest was die Zielsetzungen dieses Abschnittes betrifft. In Abbildung 5.3 zeigen wir einen Vergleich zwischen der exakten quantenmechanischen Lösung für die Transmissionswahrscheinlichkeit $P_{1 \rightarrow 1'}$ und dem Ergebnis aus Gleichung (5.4). Wie man sieht, reproduziert die Landau-Zener-Formel (5.4) das schwelennahe Verhalten nicht korrekt, da das Argument der Exponentialfunktion an der Schwelle nicht verschwindet.

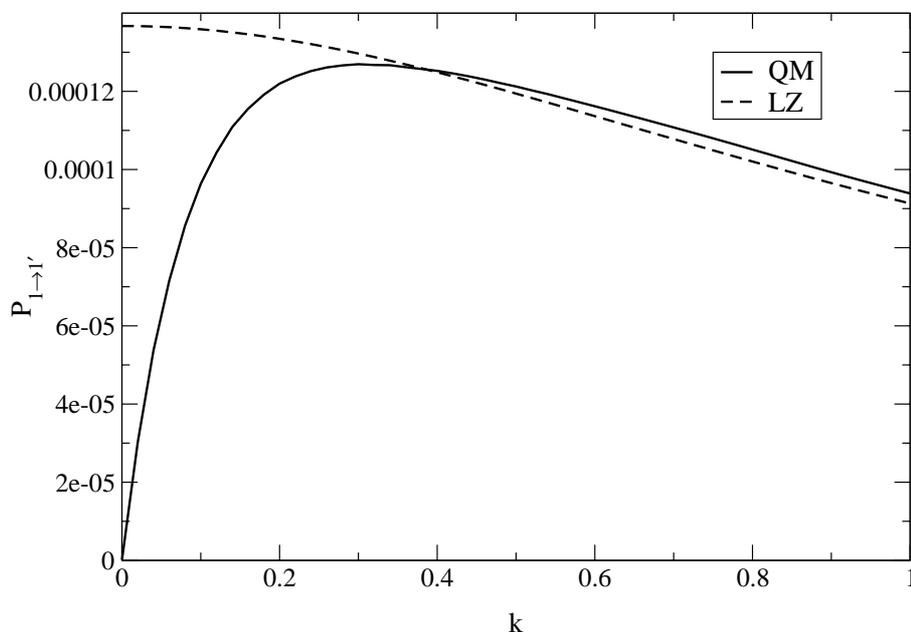


ABBILDUNG 5.3: Vergleich zwischen der quantenmechanisch bestimmten Transmissionswahrscheinlichkeit $P_{1 \rightarrow 1'}$ (durchgezogene Linie) und der Landau-Zener-Formel (5.4) (gestrichelte Linie) als Funktionen der Wellenzahl k . Die Parameter sind $v_{11} = 5.5$, $v_{22} = 26$, $\epsilon_2 = 3$, $a_{11} = a_{22} = 1$, $a_{12} = 0.05$ und $v_{12} = 0.01$. Aus [31].

Da die Landau-Zener-Formel eine semiklassische Theorie ist, berücksichtigt sie nicht den Einfluß der Quantenreflexion. Diese unterdrückt, wie wir aus den vorherigen Abschnitten wissen, auch in Mehrkanalsystemen an der Schwelle die Transmission. Die einfachste Verbesserung der Landau-Zener-Formel ist es, anzunehmen, daß die Wahrscheinlichkeit, in den Kanal 1' transmittiert zu werden, ein Produkt von unabhängigen Wahrscheinlichkeiten ist. Einerseits muß das Teilchen in den Bereich transmittiert werden, wo sich die Kurven kreuzen. Die Wahrscheinlichkeit hierfür wird durch die Einkanal-Transmissionswahrscheinlichkeit $P_u = 1 - |R|^2$ angenähert (für die Abhängigkeit von P_u von der Wellenzahl siehe Abbildung 5.4), da diese für schwache Kopplungen sehr ähnlich der gekoppelten ist. Die Summe der Wahrscheinlichkeiten ($P_{1 \rightarrow 1'}$) und ($P_{1 \rightarrow 2'}$) ist, wie man an Abbildung 5.5 sieht, ungefähr P_u . Andererseits muß das Teilchen am Punkt x_0 in den Kanal 1' überwechseln, was durch die Landau-Zener-Formel (5.4) ausgedrückt werden soll. Somit ergibt sich als

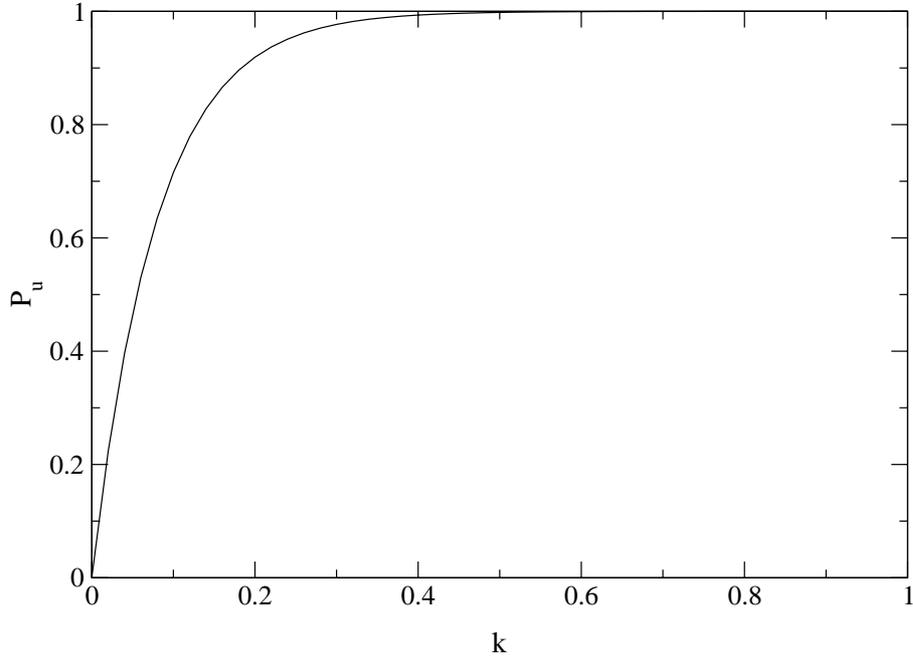


ABBILDUNG 5.4: Transmissionswahrscheinlichkeit P_u als Funktionen der Wellenzahl k für ein ungekoppeltes Woods-Saxon-Potential mit den Parametern $v_{11} = 5.5$ und $a_{11} = 1$. Aus [31].

Ansatz für unsere modifizierte Landau-Zener-Formel

$$(P_{1 \rightarrow 1'})_{LZM} = (P_{1 \rightarrow 1'})_{LZ} P_u \quad . \quad (5.5)$$

In Abbildung 5.6 zeigen wir einen Vergleich zwischen der quantenmechanisch bestimmten Transmissionswahrscheinlichkeit $P_{1 \rightarrow 1'}$ (durchgezogene Linie) und der modifizierten Landau-Zener-Formel (5.5) (gestrichelte Linie). Nun haben wir eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der quantenmechanischen Rechnung und dem Landau-Zener-Modell. Der Grund dafür, daß dieser einfache Produktansatz in diesem Fall so gut funktioniert, liegt darin, daß die Badlands, bei denen die Quantenreflexion stattfindet (siehe die gepunktete Linie in Abbildung 5.1), und der Bereich, wo sich die Potentiale kreuzen, voneinander getrennt sind. Die Diskrepanz zwischen beiden Kurven für Energien grösser als $k = 0.4$ liegt an den Unzulänglichkeiten der Landau-Zener-Formel und hängt nicht mit der Quantenreflexion zusammen, da diese in diesem Energiebereich keine wesentliche Rolle mehr spielt, wie man anhand von Abbildung 5.5 sieht.

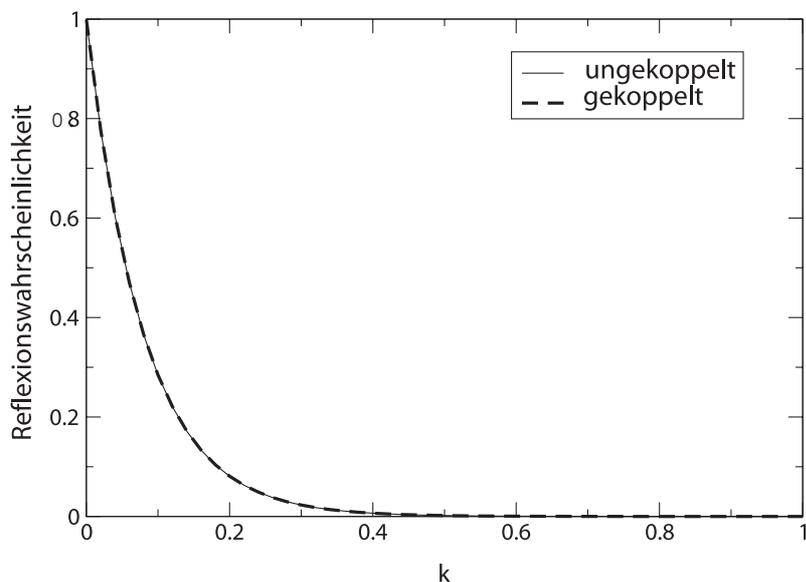


ABBILDUNG 5.5: Vergleich der Reflexionswahrscheinlichkeit eines gekoppelten Woods-Saxon-Potentials (durchgezogene Linie) und eines einzelnen Woods-Saxon-Potentials (gestrichelte Linie) das $V_{11}(x)$ (5.1) entspricht. Die Parameter sind $v_{11} = 5.5$, $v_{22} = 26$, $\epsilon_2 = 3$, $a_{11} = a_{22} = 1$, $a_{12} = 0.05$ und $v_{12} = 0.01$. Nach [31].

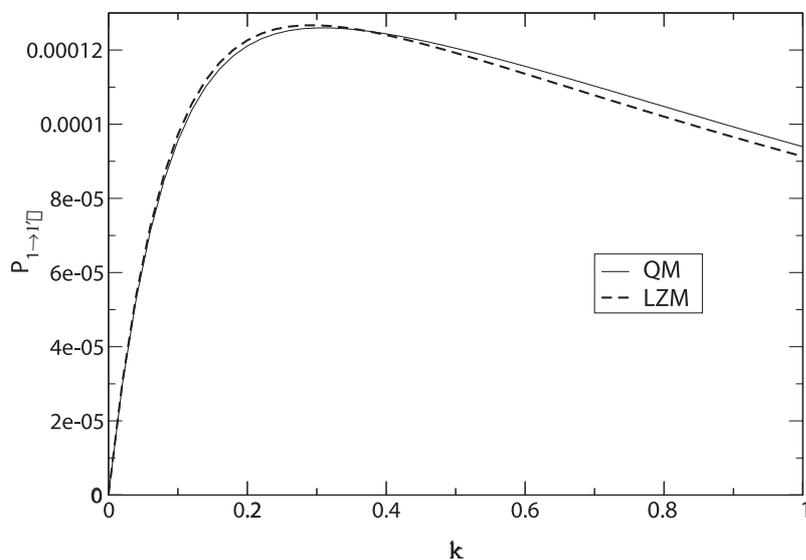


ABBILDUNG 5.6: Vergleich zwischen der quantenmechanisch bestimmten Transmissionswahrscheinlichkeit $P_{1 \rightarrow 1'}$ (durchgezogene Linie) und der modifizierten Landau-Zener-Formel (5.5) (gestrichelte Linie) als Funktionen der Wellenzahl k . Die Parameter sind $v_{11} = 5.5$, $v_{22} = 26$, $\epsilon_2 = 3$, $a_{11} = a_{22} = 1$, $a_{12} = 0.05$ und $v_{12} = 0.01$. Aus [31].

Mit Formel (5.5) kann man durch Berücksichtigung der Quantenreflexion das Landau-Zener-Modell für diese Potentialtypen auch auf niedrige Energien erweitern.

5.2 Homogene Potentiale

Im vorherigen Abschnitt haben wir gezeigt, wie man für Woods-Saxon-Potentiale die Landau-Zener-Formel (5.4) modifizieren muß, um sie auch nahe der Schwelle anwenden zu können. Nun wollen wir an Hand von sich kreuzenden homogenen Potentialen untersuchen, inwieweit man diese Modifikation auch auf andere Fälle übertragen kann. Dazu betrachten wir folgende diabatischen Potentiale (siehe auch Abbildung 5.7):

$$V_{11}(x) = -\frac{C_{11}}{x^3} \quad (5.6)$$

$$V_{22}(x) = -\frac{C_{22}}{x^3} + E_0 \quad (5.7)$$

$$V_{12}(x) = C_{12} e^{-a^2_{12}(x-x_0)^2} \quad , \quad (5.8)$$

dabei ist x_0 der Kreuzungspunkt von $V_{11}(x)$ und $V_{22}(x)$. In den Abbildungen 5.8(a-c) sehen wir einen Vergleich zwischen der quantenmechanisch bestimmten Transmissionswahrscheinlichkeit $P_{1 \rightarrow 1'}$ (durchgezogene Linie) und der modifizierten Landau-Zener-Formel (5.5) (gestrichelte Linie) für verschiedene Schwellenaufspaltungen E_0 . Der Parameter C_{22} wurde jeweils so gewählt, daß der Schnittpunkt der diabatischen Potentiale immer bei $x_0 = 1$ liegt. Die modifizierte Landau-Zener-Formel geht zwar an der Schwelle gegen Null, aber man erhält bei geringen Schwellenaufspaltungen keine gute Übereinstimmung mit der quantenmechanischen Rechnung. Diese wird erst bei größeren Werten von E_0 erreicht (siehe Abbildungen 5.8(a) und 5.8(b)). Die Ursache dafür liegt nicht in der Quantenreflexion, da diese in dem Energiebereich, wo die Differenz zwischen den beiden Kurven konstant ist, keine Rolle mehr spielt (siehe dazu Abbildung 5.9). Da homogene Potentiale keinen Bereich haben, in dem sie durch eine lineare Funktion genähert werden können, liegt der Schluß nahe, daß dies der Grund für die Diskrepanz zwischen den beiden Kurven ist. Um dies zu beheben, haben wir die Theorie von Nakamura und Zhu auf dieses Problem angewandt. Weil auch deren Ausdrücke nicht das Schwellenverhalten korrekt wiedergeben, haben wir sie mit der Transmissionswahrscheinlichkeit P_u des ungekoppelten Problems multipliziert:

$$(P_{1 \rightarrow 1'})_{NZM} = \left(1 - \exp \left[-\frac{\pi}{4ac} \left(\frac{2}{1 + \sqrt{1 + c^{-4}}} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \right) P_u \quad (5.9)$$

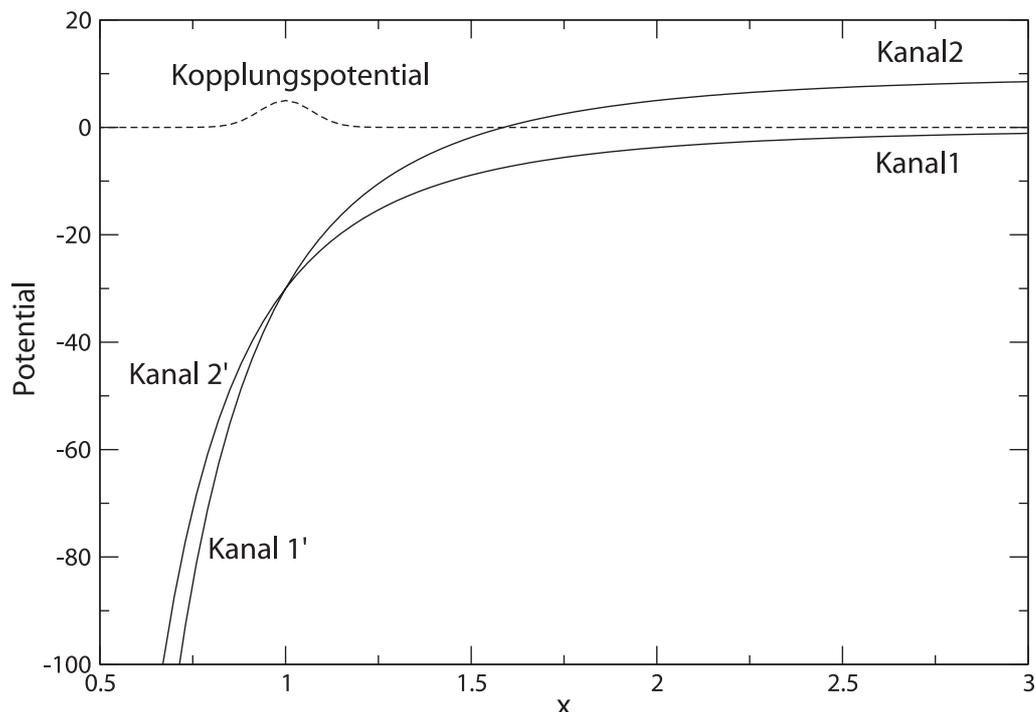


ABBILDUNG 5.7: Illustration der homogenen Potentiale (5.6) und (5.7) und des Kopplungspotentials (5.8). Die Parameter sind $C_{11} = 30$, $C_{22} = 40$, $E_0 = 10$, $a_{12} = 10$ und $C_{12} = 5$. Nach [31].

und

$$(P_{1 \rightarrow 1'})_{NZKM} = \left(1 - \exp \left[-\frac{\pi}{4ac} \left(\frac{2}{1 + \sqrt{1 + c^{-4}(0.4a^2 + 0.7)}} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \right) P_u \quad (5.10)$$

Die Abbildung 5.10 zeigt die Formel von Nakamura und Zhu ohne empirische Korrekturen (5.9) (Kreise) und den Ausdruck mit Korrekturen (5.10) (gepunktete und gestrichelte Linie) im Vergleich mit der modifizierten Landau-Zener-Formel (5.5) (gestrichelte Linie) und der quantenmechanischen Rechnung (durchgezogene Linie). Während der Ausdruck (5.9) mit Formel (5.5) übereinstimmt (aber auch nicht mit der Quantenmechanik), liefert Gleichung (5.10) eine Verschlechterung des Ergebnisses und ist somit für diesen Fall nicht verwendbar. Der Faktor $\left(\frac{2}{1 + \sqrt{1 + c^{-4}}} \right)^{\frac{1}{2}}$ in der Exponentialfunktion, der in Gleichung (5.9) den Unterschied zur modifizierten Landau-Zener-Formel (5.5) macht, kann hier vernachlässigt werden, da $|c|$ hier sehr große Werte annimmt ($|c| \approx 21$) und somit dieser ungefähr Eins wird, was zur

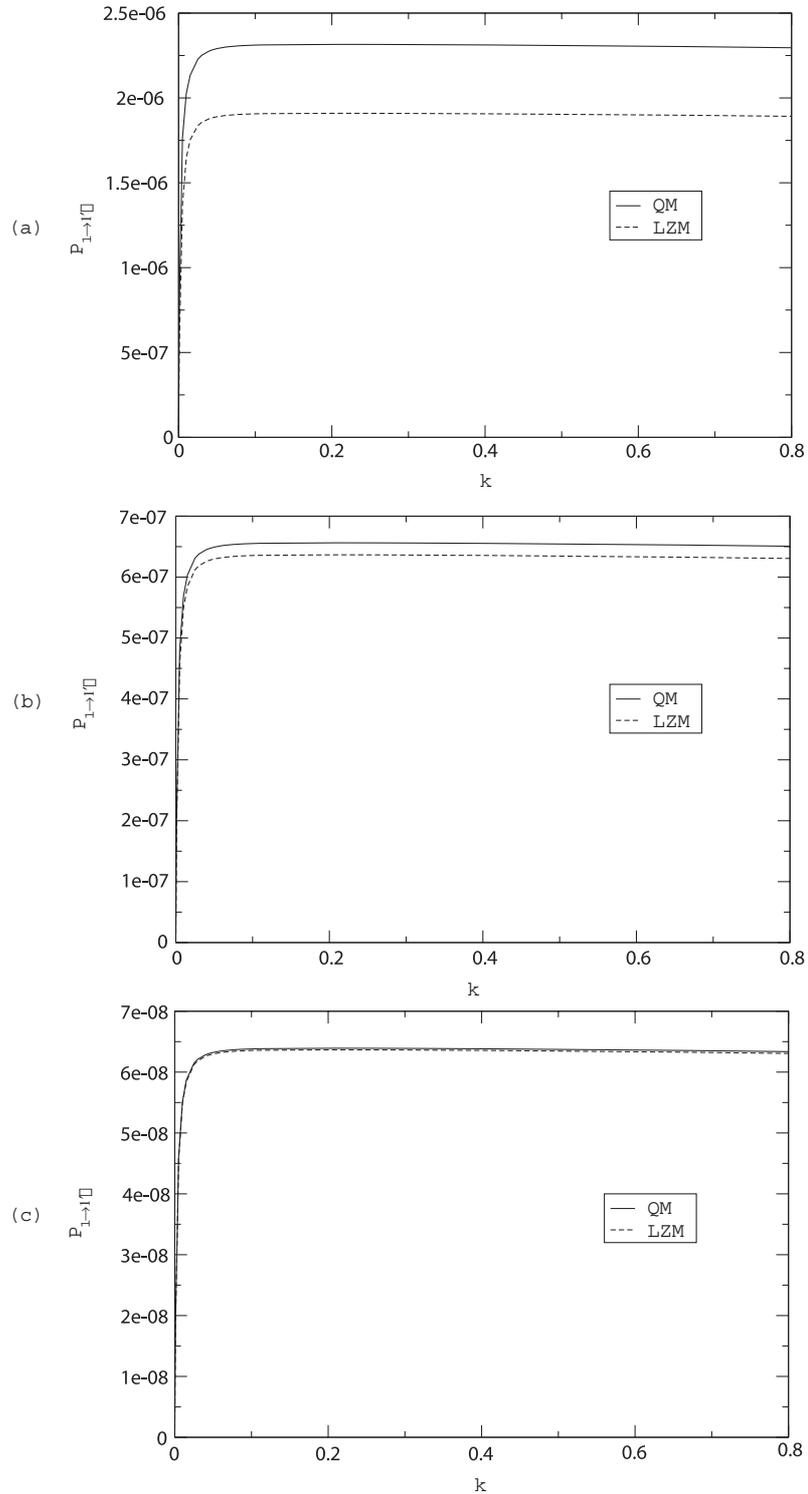


ABBILDUNG 5.8: Vergleich zwischen der quantenmechanisch bestimmten Transmissionswahrscheinlichkeit $P_{1 \rightarrow 1'}$ (durchgezogene Linie) und der modifizierten Landau-Zener-Formel (5.5) (gestrichelte Linie) für verschiedene Schwellenaufspaltungen E_0 als Funktionen der Wellenzahl k . C_{22} wurde jeweils so gewählt, daß der Schnittpunkt der diabatischen Potentiale immer bei $x_0 = 1$ liegt. Die Parameter sind $C_{11} = 30$, $a_{12} = 0.05$ und $C_{12} = 0.01$ für alle Abbildungen. Abbildung (a) zeigt die Kurven für $E_0 = 10$, (b) für $E_0 = 30$ und (c) für $E_0 = 300$.

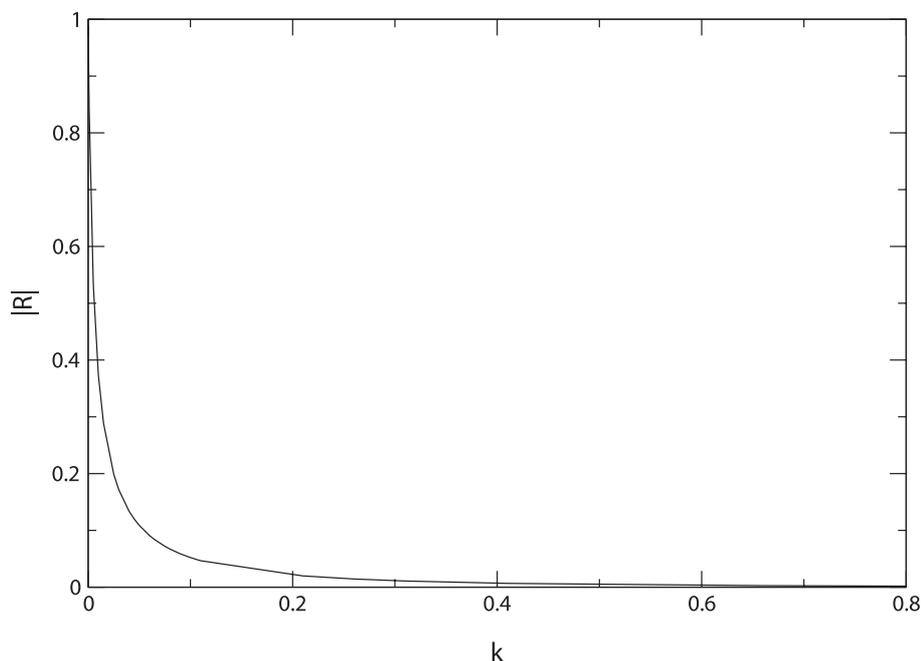


ABBILDUNG 5.9: Reflektivität $|R|$ als Funktionen der Wellenzahl k für ein ungekoppeltes homogenes Potential mit dem Parameter $C_{11} = 30$.

Übereinstimmung zwischen beiden Formeln führt. Da die Formeln von Zhu und Nakamura auch auf einer Linearisierung der Potentiale beruhen, können sie, wie man sieht, auch nicht zu einer Verbesserung des Landau-Zener-Modells beitragen.

Da die Diskrepanz zwischen der quantenmechanischen Rechnung und der modifizierten Landau-Zener-Formel über einen weiten Energiebereich konstant ist, bietet es sich an, einen Faktor β in den Exponenten von Gleichung (5.5) einzuführen, um (5.5) an die quantenmechanische Rechnung anzupassen:

$$(P_{1 \rightarrow 1'})_{LZM\beta} = \left(1 - \exp \left(-\beta \frac{2\pi V_{12}(x_0)^2}{\hbar v |\Delta F|} \right) \right) P_u \quad . \quad (5.11)$$

In Abbildung 5.11 haben wir den Faktor β als Funktion der Wellenzahl k für eine Schwellenaufspaltung $E_0 = 10$ aufgetragen. Wie erwartet, ist β über einen großen Wertebereich hin konstant, und nur nahe der Schwelle steigt der Wert um knapp 20%. Das liegt daran, daß dort die Quantenreflexion eine Rolle spielt und es doch einen geringen Unterschied zwischen der Reflektivität des ungekoppelten und der gekoppelten homogenen Potentiale gibt. Abbildung 5.12 zeigt nun die modifizierte Landau-Zener-Formel (5.11) (gestrichelte Linie) mit einem Korrekturfaktor $\beta = 1.2124$ und die quantenmechanische Rechnung (durchgezogene Linie). Beide

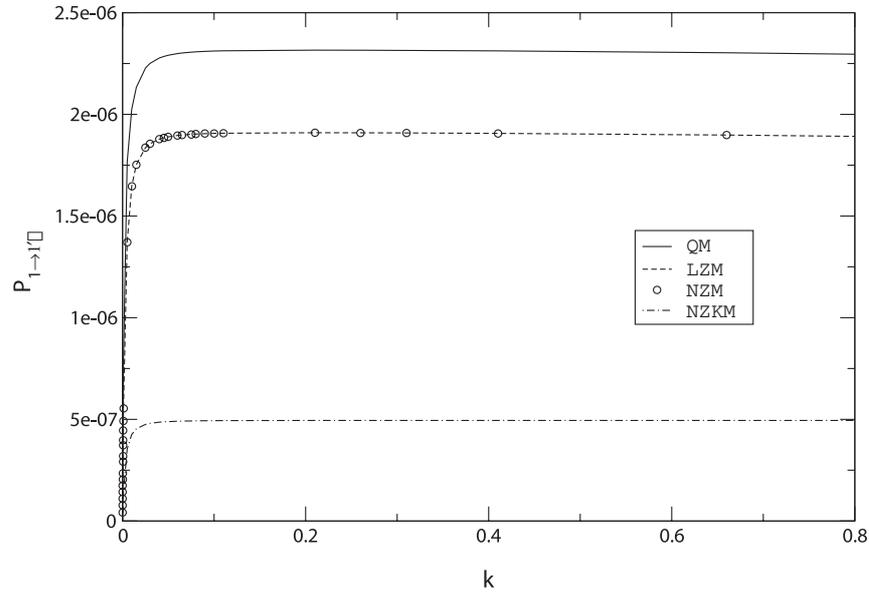


ABBILDUNG 5.10: Vergleich zwischen der quantenmechanisch bestimmten Transmissionswahrscheinlichkeit $P_{1 \rightarrow 1'}$ (durchgezogene Linie), der modifizierten Landau-Zener-Formel (5.5) (gestrichelte Linie), der Formel von Nakamura und Zhu ohne empirische Korrekturen (5.9) (Kreise) und der mit Korrekturen (5.10) (gepunktete und gestrichelte Linie). Die Parameter sind $C_{11} = 30$, $C_{12} = 40$, $a_{12} = 0.05$, $C_{12} = 0.01$ und $E_0 = 10$.

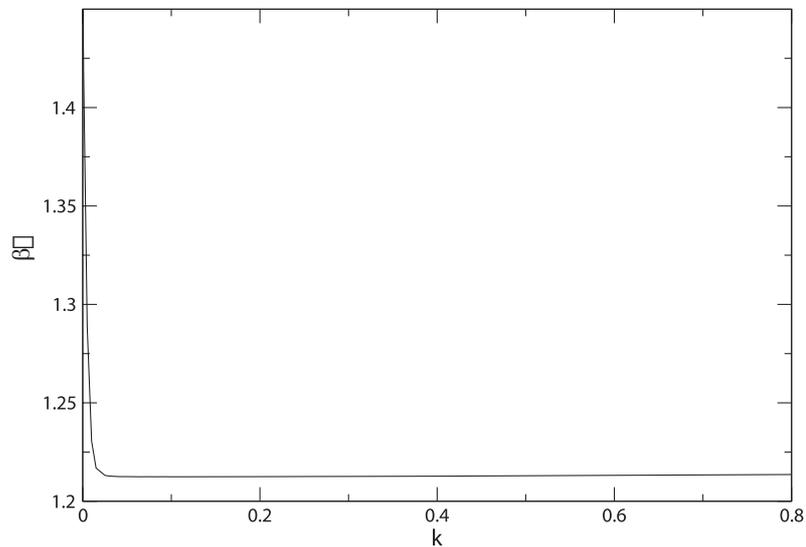


ABBILDUNG 5.11: Der Faktor β aus Gleichung (5.11), um die modifizierte Landau-Zener-Formel (5.5) an die quantenmechanische Rechnung anzupassen. Die Parameter sind $C_{11} = 30$, $C_{12} = 40$, $a_{12} = 0.05$, $C_{12} = 0.01$ und $E_0 = 10$.

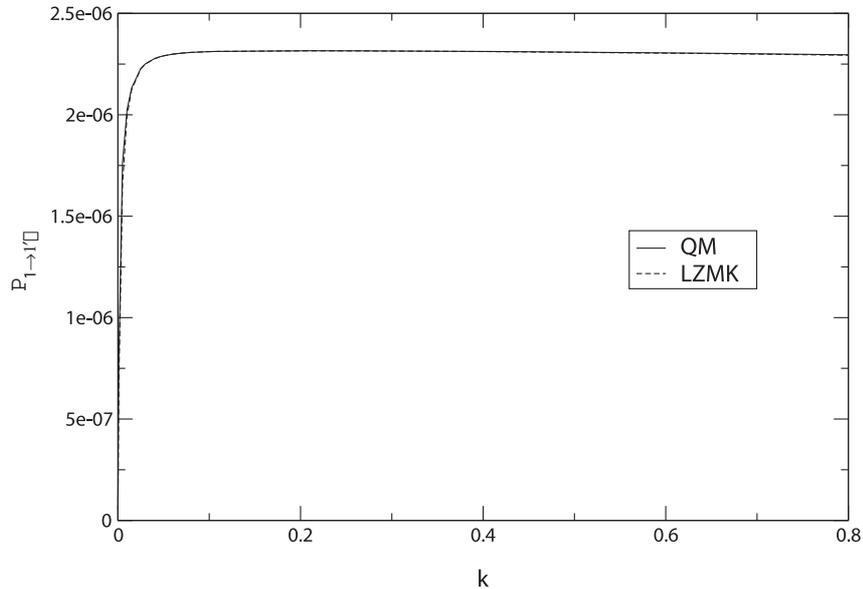


ABBILDUNG 5.12: Vergleich zwischen der quantenmechanisch bestimmten Transmissionswahrscheinlichkeit $P_{1 \rightarrow 1'}$ (durchgezogene Linie) und der modifizierten Landau-Zener-Formel (5.11) (gestrichelte Linie) mit einem Korrekturfaktor $\beta = 1.2124$. Die Parameter sind $C_{11} = 30$, $C_{12} = 40$, $a_{12} = 0.05$, $C_{12} = 0.01$ und $E_0 = 10$.

stimmen nun sehr gut überein, auch in Schwellennähe, obwohl dort ein anderer Wert für β hätte benutzt werden müssen. Damit können wir mit diesem Korrekturfaktor die quantenmechanische Transmissionswahrscheinlichkeit durch die modifizierte Landau-Zener-Formel (5.5) sehr gut annähern. Dazu reicht es, wie man an Abbildung 5.12 sieht, β nur für einen Energiewert zu bestimmen, möglichst in einem Bereich, wo die Quantenreflexion keine Rolle spielt. Dieser kann dann für einen sehr grossen Energiebereich benutzt werden, um mit der modifizierten Landau-Zener-Formel (5.5) die Transmissionswahrscheinlichkeit sehr genau anzugeben.

Zusammenfassung

Für die Quantenreflexion in einem System von gekoppelten Kanälen konnten wir zeigen, daß die Reflektivität $|R_{11}|$ im allgemeinen, wie im ungekoppelten Einkanal-fall, nahe der Schwelle ein lineares Verhalten aufzeigt und für Energie Null den Wert Eins annimmt. Im Spezialfall, daß die Schwellen der beiden Zustände entartet sind und das Kopplungspotential V_{12} den Wert $\sqrt{V_{11}V_{22}}$ hat, tritt die einzigartige wie auch außergewöhnliche Situation ein, daß die Quantenreflexion an der Schwelle nicht vollständig ist, da ein Teil der Welle ($\sin^2(\alpha)$) ungehindert im zweiten Kanal transmittiert wird. Die Anwesenheit eines für die Transmission offenen zweiten Kanals führt normalerweise dazu, daß die Reflektivität reduziert wird, während ein für die Transmission geschlossener zweiter Kanal die Reflexionswahrscheinlichkeit erhöht.

Im Falle der gekoppelten Stufenpotentiale im Kapitel 3 konnten wir zeigen, daß bei einer starken Kopplung, bei der der obere adiabatische Kanal repulsiv ist, man für eine Energie, bei der alle Reflexions- und Transmissionskanäle offen sind, für die Reflektivität des elastischen Kanals eine exakte Nullstelle bekommt. In diesem Fall erfolgt ein kompletter Transfer des inneren Freiheitsgrades vom Grundzustand in den angeregten Zustand. Anhand der gekoppelten Woods-Saxon-Potentiale konnten wir im Abschnitt 4 sehen, daß diese exakte Nullstelle für endliche Diffusitäten nicht mehr existiert, sondern man erhält stattdessen nur noch ein globales Minimum der Reflektivität des elastischen Kanals. Der Grund hierfür liegt darin, daß die Reflektivität nun keine reelle Funktion mehr ist und es daher sehr unwahrscheinlich ist, daß Imaginär- und Realteil an der gleichen Stelle Null werden.

Im Abschnitt 4.2 haben wir ein System untersucht, bei dem das Kopplungspotential eine andere Reichweite hat als die diagonalen Potentiale $V_{11}(x)$ und $V_{22}(x)$. Dabei haben wir uns an einer von von Marani et al. [28] betrachteten experimentellen

Situation orientiert. Auch bei unterschiedlicher Reichweite der Potentiale zeigt die Reflektivität ein lineares Verhalten nahe der Schwelle und geht für Energie Null gegen Eins. Für die Berechnung der Reflektivität durften die optischen Potentiale in den Diagonaleinträgen der Potentialmatrix nicht vernachlässigt werden (obwohl der Unterschied der Potentialkonstanten 10 Größenordnungen beträgt), da man sonst den Beitrag des exponentiellen Potentials zur Quantenreflexion nicht angemessen berücksichtigt. Denn, wie wir aus den Betrachtungen zum Einkanalfall wissen (siehe Gleichung 1.34), hängt die Reflektivität des Exponentialpotentials nicht von der Potentialstärke ab, sondern vom Faktor im Exponenten. Zudem kreuzen sich die diabatischen Potentiale erst bei Anwesenheit der optischen Potentiale in den Diagonalen. Wie man an Abbildung 4.7 sieht, führt die Vernachlässigung bei niedrigen Energien ($k \leq 0.002$ a.u.) zu deutlich niedrigeren Reflektivitäten. Im 5. Kapitel haben wir gezeigt, daß man die Landau-Zener-Formel (5.4) für schwache Kopplungen mit der Transmissionswahrscheinlichkeit des ungekoppelten Problems multiplizieren muß, um das richtige asymptotische Verhalten an der Schwelle zu erhalten. Dies hat bei den Woods-Saxon-Potentiale sehr gut funktioniert, aber bei homogenen Potentialen wurde die Übereinstimmung zwischen der modifizierten Landau-Zener-Formel (5.5) und dem exakten quantenmechanischen Ergebnis erst bei äußerst großen Schwellenaufspaltungen sehr gut. Ursache hierfür ist nicht die Quantenreflexion, da die Diskrepanz auch noch in Energiebereichen auftritt, wo diese vernachlässigt werden kann, sondern die Tatsache, daß es auf Grund der Skalierbarkeit der homogenen Potentiale keinen Bereich gibt, in dem die lineare Näherung, die der Landau-Zener-Theorie zu Grunde liegt, gerechtfertigt ist. Da auch das Modell von Zhu und Nakamura auf einer linearen Näherung der Potentiale beruht, liefert es ebenfalls keine Verbesserung der Ergebnisse wie man an Abbildung 5.10 sieht. Durch Einführung eines konstanten Faktors β in die Landau-Zener-Formel (5.11) konnten wir eine sehr gute Übereinstimmung zwischen dieser und der quantenmechanischen Rechnung erhalten (siehe Abbildung 5.12). Der Vorteil dieses Faktors liegt darin, daß er nur einmal für eine einzige Energie (möglichst in einem Bereich, wo die Quantenreflexion keine Rolle mehr spielt) bestimmt werden muß und dann kann man mit seiner Hilfe über einen sehr großen Energiebereich (auch dort, wo die Quantenreflexion wichtig ist) die Landau-Zener-Formel verbessern.

Dies legt nahe, in einer zukünftigen Arbeit zu versuchen, einen analytischen Ausdruck für β herzuleiten, ohne dabei aber die Potentiale durch lineare Kurven zu nähern. Eine Weiterentwicklung der Arbeit von Zhu und Nakamura könnte eventuell der Schlüssel zu diesem Vorhaben sein.

Das zur Zeit rege Interesse an Experimenten mit evaneszenten Wellen liefert sicher-

lich noch einige interessante Fragen über die Quantenreflexion und ihren Einfluß auf die nichtadiabatischen Übergänge. Zudem wäre es auch wichtig, zu sehen, welche genauen Auswirkungen die Struktur der Oberfläche auf die Quantenreflexion bei Atom-Oberflächen-Wechselwirkungen hat und wie man sich diese zu Nutze machen kann, um Quantenreflexion auch bei hohen Energien zu erhalten. Dabei soll auf die Arbeit von Shimizu und Fujita [52] verwiesen werden, die mit Hilfe von periodisch strukturierten Oberflächen die Quantenreflexion im Hochenergielimes um einige Zehnerpotenzen steigern konnten.

Literaturverzeichnis

- [1] V. I. Balykin, V. S. Letokhov, Yu. B. Ovchinnikov und A.I. Sidorov, JETP Lett. **45**, 353 (1987).
- [2] V. I. Balykin, V. S. Letokhov, Yu. B. Ovchinnikov und A.I. Sidorov, Phys. Rev. Lett. **60**, 2137 (1988).
- [3] C. R. Bennett, J. B. Kirk und M. Babiker, Phys. Rev. A **63**, article no. 033405 (2001).
- [4] J. J. Berkhout, O. J. Luiten, I. D. Setija, T. W. Hijmans, T. Mizusaki und J. T. M. Walraven, Phys. Rev. Lett. **63**, 1689, (1989).
- [5] M. V. Berry und K. E. Mount, Rep. Prog. Phys **35**, 315 (1972).
- [6] J. Böheim, W. Brenig und J. Stutzki, Z. Phys. B **48**, 43 (1982).
- [7] J. R. Bolton, N. Mataga und G. McLendon, eds., *Electron Transfer in Inorganic, Organic, and Biological Systems*, Advances in Chemistry Series 228, American Chemical Society, Washington DC (1991).
- [8] M. L. Brillouin, J. Phys. Radium **6**, 353(1926).
- [9] H. B. G. Casimir und D. Polder, Phys. Rev. **73**, 360 (1948).
- [10] L. Cagnet, V. Savalli, G. Zs. K. Horvath, D. Holleville, R. Marani, N. Westbrook, C. I. Westbrook und A. Aspect Phys. Rev. Lett. **81**, 5044 (1998).
- [11] V. I. Cook und R.K. Hill, Opt. Commun. **43**, 258 (1982).
- [12] R. Côté, H. Friedrich und J. Trost, *Phys. Rev. A* **56** 1781 (1997).
- [13] R. Côté, B. Segev und M. G. Raizen, Phys. Rev. A **58**, 3999 (1998).
- [14] P. V. Coveney, M. S. Child und A. Barany, J. Phys. B **18**, 4557 (1985).

-
- [15] J. M. Doyle, J. C. Sandberg, I. A. Yu, C. L. Cesar, D. Kleppner und T. J. Greytak, Phys. Rev. Lett. **67** 603 (1991).
- [16] C. Eltschka, *WKB im anticlassischen Grenzfall*, Shaker Verlag, Aachen, (2001).
- [17] C. Eltschka, M. J. Moritz und H. Friedrich, J. Phys. B **33**, 4033 (2000).
- [18] C. Eltschka, H. Friedrich und M. J. Moritz, Phys. Rev. Letter **86**, 2693 (2001).
- [19] H. Friedrich, *Theoretical Atomic Physics*, 2. Auflage, Springer Verlag, Berlin (1998).
- [20] H. Friedrich, G. Jacoby und C. G. Meister, Phys. Rev. A **65**, article no. 032902 (2002).
- [21] G. F. Gribakin und V. V. Flambaum, Phys. Rev. A **48**, 546 (1993).
- [22] Georg K. H. Jacoby, Doktorarbeit, Technische Universität München (2002); <http://tumb1.biblio.tu-muenchen.de/publ/diss/ph/2002/jacoby.html>.
- [23] J. B. Keller, Ann. of Phys. (N.Y.) **4**, 180 (1958).
- [24] H. A. Kramers, Zeits. f. Physik **39**, 828 (1926).
- [25] L. D. Landau, Phys. Z. Sowjetunion **1**, 88 (1932).
- [26] L. D. Landau, Phys. Z. Sowjetunion **2**, 46 (1932).
- [27] L. Landau und E. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, Addison Wesley, Reading, Mass. (1958).
- [28] R. Marani, L. Cогnet, V. Savalli, N. Westbrook, C. I. Westbrook und A. Aspect, Phys. Rev. A **61**, article no. 053402 (2000).
- [29] M. Marinescu, A. Dalgarno und J. F. Babb, Phys. Rev. A **55**, 1530 (1997).
- [30] C. G. Meister und H. Friedrich, Phys. Rev. A **66**, article no. 042718 (2002).
- [31] C. G. Meister und H. Friedrich, Radiation Physics and Chemistry **68**, 211 (2003)
- .
- [32] P. Meystre und M. Sargent III, *Elements of Quantum Optics*, Springer Verlag, Berlin (1999).

- [33] J. Michl und V. Bonacic-Koutecky, *Electronic Aspects of Organic Photochemistry*, John Wiley and Sons, New York (1990).
- [34] A. Mody, M. Haggerty, J. M. Doyle und E. J. Heller, Phys. Rev. B **64**, article no. 085418 (2001).
- [35] Michael J. Moritz, Doktorarbeit, Technische Universität München (2001); <http://tumb1.biblio.tu-muenchen.de/publ/diss/ph/2001/moritz.html>.
- [36] H. Nakamura, *Nonadiabatic Transitions*, World Scientific, Singapore (2002).
- [37] V. U. Nayak, D. O. Edwards und N. Mashura, Phys. Rev. Lett. **50**, 990 (1983).
- [38] R. G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1982.
- [39] E. E. Nikitin, *Theory Of Elementary Atomic And Molecular Processes in Gases*, Clarendon Press, Oxford (1974).
- [40] E. E. Nikitin und S. Ya. Umanskii, *Theory Of Slow Atomic Collisions*, Springer Verlag, Berlin (1984).
- [41] V. I. Osherov und H. Nakamura, J. Chem. Phys. **105**, 2770 (1996).
- [42] V. I. Osherov und H. Nakamura, Phys. Rev. A **59**, 2486 (1999).
- [43] V. I. Osherov, V. G. Ushakov und H. Nakamura, Phys. Rev. A **57**, 2672 (1998).
- [44] L. Pichl, V. I. Osherov, V. G. Ushakov und H. Nakamura, J. Phys. A **33**, 3361 (2000).
- [45] V. L. Prokovskii, S. K. Savvinykh und F. K. Ulinich, Sov. Phys. JETP **34**, 879 (1958).
- [46] V. L. Prokovskii, F. K. Ulinich und S. K. Savvinykh, Sov. Phys. JETP **34**, 1119 (1958).
- [47] H. R. Sadeghpour, J. L. Bohn, M. J. Cavagnero, B. D. Esry, I. I. Fabrikant, J. H. Macek und A. R. P. Rau, J. Phys. B **33**, R93 (2000).
- [48] B. Segev, R. Côté und M. G. Raizen, Phys. Rev. A **56**, R3350 (1997).
- [49] S. S. Shaik und P. C. Hiberty, *Theoretical Models of Chemical Bonding*, Part 4, ed. Z. B. Maksic Springer Verlag, Berlin (1991), S. 269.

- [50] F. Shimizu, Phys. Rev. Lett. **86**, 987 (2001).
- [51] F. Shimizu und J. Fujita, Phys. Rev. Lett. **88**, 123201 (2002).
- [52] F. Shimizu und J. Fujita, J. Phys. Soc. Jpn. **71**, 5 (2002).
- [53] P. Szriftgiser, D. Guery-Odelin, M. Arndt und J. Dalibard, Phys. Rev. Lett. **77**, 4 (1996).
- [54] J. Trost, C. Eltschka und H. Friedrich, Europhys. Lett. **43**, 230 (1998).
- [55] J. Trost, C. Eltschka und H. Friedrich, J. Phys. B **31**, 361 (1998).
- [56] J. Weiner, V. S. Bagnato, S. Zilio und P. S. Julienne, Rev. Mod. Phys. **71**, 1 (1999).
- [57] G. Wentzel, Zeits. f. Physik **38**, 518 (1926).
- [58] Z.-C. Yan und J. F. Babb, Phys. Rev. A **58**, 1247 (1998).
- [59] I. A. Yu, J. M. Doyle, J. C. Sandberg, C. L. Cesar, D. Kleppner und T. J. Greytak, Phys. Rev. Lett. **71**, 1589 (1993).
- [60] C. Zener, Proc. Roy. Soc. London A **137**, 696 (1932).

Danksagung

Nachdem die Arbeit zu einem Abschluß gekommen ist, ist es an der Zeit, sich für die vielseitige Unterstützung zu bedanken.

Meinem Doktorvater, **Herrn Prof. Dr. Harald Friedrich**, der mir die Möglichkeit gab, dieses interessante Thema in seiner Arbeitsgruppe zu behandeln. Er war jederzeit für Fragen und Diskussionen aufgeschlossen und hatte ein ständiges Interesse am Fortgang der Arbeit.

Christopher Eltschka und **Michael Moritz**, die mir beim Einstieg in das Thema sehr geholfen und mir die Funktionsweise der Isodar-Routine nähergebracht haben.

Georg Jacoby für die angenehme Zusammenarbeit und für wertvolle Diskussionen.

Daniele Tortorella, **Benedikt Gaißmaier** und **Sebastian Jäger** für die willkommenen Auflockerungen des Garchinger Alltags.

Hannelore Fleißer und **Sigfried Lang**, die mir immer bei Computerproblemen geholfen haben.

Luzia, die sehr viel Verständnis und Geduld hatte und tapfer gegen meine Satzzeichenfehler und Rechtschreibschwäche gekämpft hat.

Meinem **Vater** für seine stetig liebevolle Unterstützung.