

TECHNISCHE UNIVERSITÄT MÜNCHEN  
Fakultät für Physik

# Das Schwellenverhalten von Streuphasen in singulären Potentialen

Florian Arnecke

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

Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)

genehmigten Dissertation.

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

Prüfer der Dissertation: 1. Univ.-Prof. Dr. Harald Friedrich

2. Univ.-Prof. Dr. Philipp Scherer

Die Dissertation wurde am 15.12.2008 bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die Fakultät für Physik am 19.01.2009 angenommen.



# Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	i
Abbildungsverzeichnis	iii
Tabellenverzeichnis	iv
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Grundlagen</b>	<b>5</b>
2.1 Die WKB-Methode – eine semiklassische Approximation . . . . .	5
2.1.1 Der klassische und anticlassische Limes der Schrödinger-Gleichung . .	5
2.1.2 Die WKB-Methode . . . . .	7
2.2 Transmission, Reflexion und Quantenreflexion . . . . .	9
2.2.1 Quantenreflexion an attraktiven, singulären Potentialen . . . . .	13
2.2.2 Nachweis der Quantenreflexion im Experiment . . . . .	14
2.3 Der Einfluss der Retardierung auf die Streuung von Atomen . . . . .	16
<b>3 Streutheorie in drei Dimensionen</b>	<b>19</b>
3.1 Grundlagen . . . . .	19
3.1.1 Allgemeine Aussagen zur Streutheorie . . . . .	19
3.1.2 Die Partialwellenmethode, Streuphasen und $S$ -Matrix . . . . .	21
3.2 Schwellennahe Quantenreflexion . . . . .	24
3.2.1 Beispiel: Stufenpotential . . . . .	26
3.2.2 Schwellenverhalten der Reflexion in homogenen, singulären Potentia-	
len . . . . .	27
3.3 Effective-range Theorie . . . . .	29
3.3.1 Effective-range Theorie für Quantenreflexion . . . . .	30
3.3.2 Effective-range Theorie für homogene Potentiale . . . . .	33
3.3.3 Vergleich zwischen repulsiven und attraktiven, singulären Potentialen	36
3.4 Höhere Partialwellen: Die Jost-Funktionen . . . . .	38
3.4.1 Jost-Funktionen und die Matching-Methode . . . . .	39
3.4.1.1 Beispiel: Stufenpotential . . . . .	41
3.4.2 Jost-Funktionen und attraktive, singuläre Potentiale . . . . .	42
3.4.2.1 Bestimmung der Jost-Lösungen für homogene, singuläre Po-	
tentiale . . . . .	42
3.4.2.2 Die Wahl der Randbedingungen . . . . .	45
3.4.2.3 Der Fall $l = 0$ . . . . .	46
3.4.2.4 Der Fall $l \neq 0$ . . . . .	48
3.4.3 Vergleich zwischen attraktiven und repulsiven Potentialen . . . . .	55
3.5 Anwendung: Streuung ultrakalter Atome an einer leitenden Kugel . . . . .	56
3.5.1 Atom-Kugel-Potential . . . . .	56

3.5.2	Elastische Streuung . . . . .	58
3.5.3	Anwendung . . . . .	59
3.6	Zusammenfassung der Ergebnisse . . . . .	63
<b>4</b>	<b>Streutheorie in zwei Dimensionen</b>	<b>65</b>
4.1	Grundlagen . . . . .	66
4.2	Streulängen und effective-range Entwicklung in zwei Dimensionen . . . . .	68
4.2.1	$s$ -Wellenstreuung an repulsiven Potentialen . . . . .	68
4.2.2	Quantenreflexion . . . . .	71
4.2.3	Anwendung an den homogenen Potentialen $\pm 1/r^\alpha$ . . . . .	73
4.2.3.1	$s$ -Wellenstreuung an repulsiven Potentialen . . . . .	73
4.2.3.2	Quantenreflexion an attraktiven Potentialen . . . . .	74
4.2.3.3	Der Sonderfall: $\alpha = 4$ . . . . .	80
4.3	Höhere Drehimpulsquantenzahlen $m$ . . . . .	83
4.4	Zusammenfassung der Ergebnisse . . . . .	89
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>93</b>
<b>A</b>	<b>Integralgleichungen als Lösungen von Differentialgleichungen</b>	<b>97</b>
<b>B</b>	<b>Wechselwirkung von Atomen mit Oberflächen</b>	<b>101</b>
B.1	Atom-Wand-Wechselwirkung . . . . .	101
B.2	Atom-Kugel-Wechselwirkung . . . . .	103
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>106</b>

# Abbildungsverzeichnis

2.1	$ Q_\alpha(r) $ aus Gleichung (2.31) für $\alpha = 3$ bis $\alpha = 7$ mit $k = \beta = 1$ . . . . .	9
2.2	Teilchen der Energie $E$ unter dem Einfluss eines beliebigen Potentials $V(r)$ . . . . .	10
2.3	Schematische Darstellung der Potentialbarriere und des Potentialtopfs . . . . .	11
2.4	Veranschaulichung von Gleichung (2.39) . . . . .	12
2.5	$P_R$ und $P_T$ für die Potentialbarriere und den Potentialtopf . . . . .	13
2.6	$ Q_3(r) $ für ein van der Waals-Potential $-\beta_3/r^3$ bei konstanter Energie . . . . .	14
2.7	$ Q_3(r) $ für ein van der Waals-Potential $-\beta_3/r^3$ für verschiedene Temperaturen . . . . .	15
2.8	Experimenteller Nachweis von Quantenreflexion . . . . .	16
2.9	Einfluss des Parameters $\rho$ auf die Reflexionswahrscheinlichkeit $P_R$ . . . . .	17
3.1	Schematische Darstellung eines Streuexperimentes . . . . .	20
3.2	Schematische Darstellung der wesentlichen Größen der Streutheorie . . . . .	21
3.3	Geometrische Interpretation der Streulänge $a_0$ . . . . .	23
3.4	Schematische Darstellung der Randbedingungen (3.21) . . . . .	24
3.5	Schematische Darstellung des Stufenpotentials . . . . .	26
3.6	$ R_S(k) ^2$ und $\arg R_S(k)$ für das Stufenpotential mit einlaufenden WKB-Wellen . . . . .	28
3.7	Reflektivität $ R_{l=0}(k) ^2$ und Phase $\arg R_{l=0}(k)$ für die $s$ -Wellenquantenreflexion am homogenen, attraktiven Potential (3.42) . . . . .	29
3.8	Differenz $\Delta_{l=0}(k\beta_6)$ aus (3.91) geteilt durch $(k\beta_6)^3$ . . . . .	35
3.9	Vergleich der Randbedingungen zwischen attraktiven und repulsiven Potentials . . . . .	37
3.10	Differenz $\Delta_{l=0}(k\beta_5)$ aus (3.164) geteilt durch $(k\beta_5)^4$ . . . . .	47
3.11	Differenz $\Delta_{l=1}(k\beta_5)$ aus (3.170) geteilt durch $(k\beta_5)^5$ . . . . .	50
3.12	Wahrscheinlichkeit $ R_{l=0}(k) ^2$ für die $s$ -Wellenquantenreflexion am homogenen attraktiven Potential (3.42) in drei Dimensionen . . . . .	51
3.13	Argument $\arg R_{l=0}(k)$ für die $s$ -Wellenquantenreflexion am homogenen attraktiven Potential (3.42) in drei Dimensionen . . . . .	52
3.14	Wahrscheinlichkeit $ R_{l=1}(k) ^2$ für die Reflexion an der $p$ -Wellen-Zentrifugalbarriere am homogenen attraktiven Potential (3.42) in drei Dimensionen . . . . .	53
3.15	Argument $\arg R_{l=1}(k)$ für die Reflexion an der $p$ -Wellen-Zentrifugalbarriere am homogenen attraktiven Potential (3.42) in drei Dimensionen . . . . .	54
3.16	Verschiedene Bereiche des Atom-Kugel-Potentials . . . . .	57
3.17	Differenzieller Wirkungsquerschnitt bei $\theta = \frac{\pi}{2}$ für die elastische Streuung von He( $2^3S$ )-Atomen und Na-Atomen im Grundzustand an einer absorbierenden Kugel mit einem Radius von $R_K = 200$ a.u. . . . .	60
3.18	Einfluss des Atom-Wand-Potentials auf den differentiellen Wirkungsquerschnitt von Na-Atomen an einer Kugel vom Radius von $R_K = 200$ a.u. . . . .	61
3.19	Analog zu Abbildung 3.17, nur mit $R_K = 2000$ a.u. . . . .	62

3.20	Asymmetrie (3.195) für die elastische Streuung von He( $2^3S$ )-Atomen und Na-Atomen im Grundzustand an einer absorbierenden Kugel mit dem Radius $R_K = 200$ a.u. . . . . .	64
3.21	Analog zu Abbildung 3.20, nur für $R_K = 2000$ a.u. . . . . .	64
4.1	Geometrische Deutung der $s$ -Wellenstrelänge $a$ in zwei Dimensionen . . . . .	69
4.2	Streuphase $\delta_{m=0}(k)$ für die $s$ -Wellenstreuung am homogenen repulsiven Potential (4.45) in zwei Dimensionen . . . . .	75
4.3	Differenz $\Delta_{m=0}(k\beta_5)$ aus (4.54) geteilt durch $(k\beta_5)^2$ als Funktion von $k\beta_5$ . . . . .	76
4.4	Wahrscheinlichkeit $ R_{m=0}(k) ^2$ für die $s$ -Wellenquantenreflexion in zwei Dimensionen . . . . .	78
4.5	Argument $\arg R_{m=0}(k)$ für die $s$ -Wellenquantenreflexion am homogenen attraktiven Potential (4.55) in zwei Dimensionen . . . . .	79
4.6	Differenz $\Delta_{m=0}(k\beta_4)$ aus (4.87) geteilt durch $(k\beta_4)^2$ . . . . .	83
4.7	Differenz $\Delta_{m=1}(k\beta_5)$ aus (4.109) geteilt durch $(k\beta_5)^3$ . . . . .	87
4.8	Streuphase $\delta_{m=1}(k)$ für die $p$ -Wellenstreuung am homogenen repulsiven Potential (4.45) in zwei Dimensionen . . . . .	88
4.9	Wahrscheinlichkeit $ R_{m=1}(k) ^2$ für die Reflexion an der $p$ -Wellen-Zentrifugalbarriere am homogenen attraktiven Potential (4.55) in zwei Dimensionen . . . . .	90
4.10	Argument $\arg R_{m=1}(k)$ für die Reflexion an der $p$ -Wellen-Zentrifugalbarriere am homogenen attraktiven Potential (4.55) in zwei Dimensionen . . . . .	91
B.1	Schematische Darstellung der Spiegelladungsmethode . . . . .	102
B.2	Dipol-Dipol-Wechselwirkung zwischen zwei Atomen . . . . .	103
B.3	Veranschaulichung der Koordinaten zur Herleitung der Dipol-Dipol-Wechselwirkung zwischen zwei Atomen . . . . .	104

# Tabellenverzeichnis

2.1	Stärkeparameter $C_3, C_4$ und die daraus resultierenden charakteristischen Längen $\beta_3, \beta_4$ sowie $L$ (jeweils in a.u.) und $\rho$ für verschiedene Elemente . . . . .	18
3.1	Mittlere Streulänge $\bar{a}_\alpha$ (3.49), Schwellenlänge $b_\alpha$ (3.48) und die Phase $\phi_0$ (3.47) für Quantenreflexion an den homogenen Potentialen (3.42) . . . . .	29
3.2	Numerische Werte für $\bar{a}_\alpha, b_\alpha, \mathcal{R}_{\text{eff},0}$ und $\Lambda_\alpha$ für die drei-dimensionale effective-range Theorie . . . . .	36
3.3	Schwanzparameter $\mathcal{A}_0 - R_K = \bar{a} - ib, \Lambda$ und $\mathcal{A}_1(R_K \rightarrow 0)$ für homogene Potentiale $V(s) = -C_\alpha/s^\alpha$ für $\alpha = 6$ bzw. $\alpha = 7$ . . . . .	59
3.4	Charakteristische Längen (in a.u.) $\beta_3$ und $\beta_4$ sowie die $R_K$ -abhängigen Längen $\beta_6(R_K), \beta_7(R_K)$ für He( $2^3S$ ) und Na und einer Kugel mit $R_K = 200$ a.u. bzw. $R_K = 2000$ a.u. . . . .	63
4.1	Charakteristischen Parameter für homogene Potentiale in zwei Dimensionen	80
4.2	Die Potenz $\rho$ ist die Ordnung des ersten Terms, der nicht in der Entwicklung (4.95) aufgeführt ist bzw. berücksichtigt werden darf . . . . .	85





# Kapitel 1

## Einleitung

1924 sagte Einstein [1] – basierend auf einer Theorie von Bose [2] – einen neuen Aggregatzustand, das *Bose-Einstein-Kondensat* (BEC), vorher, bei dem alle ununterscheidbaren Teilchen sich im gleichen quantenmechanischen Grundzustand befinden und der *Bose-Einstein-Statistik* genügen. Nach dem Pauli-Prinzip ist dieser Zustand nur mit Bosonen zu erreichen und tritt nur bei extrem niedrigen Temperaturen nahe dem absoluten Nullpunkt bei  $T = 0$  K auf. Ein BEC ist ein makroskopisches Quantenobjekt, bei dem (im Idealfall) alle Atome durch eine einzige Wellenfunktion beschrieben werden können. Die Theorie wurde im Hinblick auf den Temperaturbereich kritisiert, bei dem die Bose-Einstein-Kondensation stattfinden sollte: die Theorie sei zwar richtig, aber leider experimentell nicht zugänglich, da die notwendigen Temperaturen zur Erzeugung eines BEC's zu niedrig sind. Die Kritik verstummte allerdings 1995, als es der Gruppe von Eric Cornell in Boulder [3] und der Gruppe von Wolfgang Ketterle am MIT [4] gelang, ein BEC im Experiment herzustellen. Seitdem liefern BEC's eine neue Möglichkeit zur Untersuchung von Phänomenen wie Suprafluidität [5], Mott-Isolatoren [6], Quantenkohärenz [7] bzw. Quanteninformation [8]. Derartig niedrige Temperaturen erlauben es auch, die Wechselwirkung von Atomen mit Oberflächen genauer zu untersuchen. Deren Verständnis ist Grundvoraussetzung für den Entwurf und die Entwicklung von atomaren Wellenleitern oder verwandten Bauteilen [9], die für den Transport von Materie genutzt werden können. Bei ausreichend kleinen Energien wird die Atom-Oberflächen-Wechselwirkung stark durch quantenmechanische Effekte wie z.B. der *Quantenreflexion* [10] dominiert, die eine klassische verbotene Reflexion ohne klassischen Umkehrpunkt beschreibt. Sie ist ein sowohl experimentell [11, 12] als auch theoretisch [13, 14] gut verstandener Vorgang und bietet z.B. eine Möglichkeit zur Konstruktion von Fallen [15, 16].

Die meisten Arbeiten auf diesem Gebiet basieren allerdings auf der Streuung ultrakalter Atome an einer (perfekt) leitenden Wand. Diese haben, zumindest experimentell, den Nachteil, dass nur die Reflexionswahrscheinlichkeit  $P_R$  zugänglich ist, die Phase der Reflexion  $R$  aber aus messtechnischen Gründen nicht leicht bestimmt werden kann. Aussagekräftiger sind Experimente an strukturierten Oberflächen, bei denen bereits Quantenreflexion gemessen wurde [17]. Derartige Experimente benötigen allerdings zur theoretischen Beschreibung aufwändige Theorien, die im Allgemeinen nicht mehr analytisch gelöst werden können. Eine Alternative hierzu bietet die Streuung an absorbierenden, gekrümmten Oberflächen, bei denen typischer Weise das Wechselwirkungspotential asymptotisch schneller abfällt als  $-1/r^2$  und durch ein radialsymmetrisches, homogenes, attraktives, singuläres Potential

$$V(r) = -\frac{C_\alpha}{r^\alpha}, \quad \alpha > 2 \quad (1.1)$$

beschrieben werden kann. Die Wechselwirkung von Atomen mit einer flachen Wand wird für kleine Abstände  $r$  durch ein nicht-retardiertes van der Waals-Potential proportional zu  $-1/r^3$  in (1.1) beschrieben [18], für große Abstände, wenn Retardierungseffekte eine Rolle

spielen, durch das hoch retardierte Casimir-Polder-Potential proportional zu  $-1/r^4$  [19]. Im Fall der Streuung von Atomen an einer Kugel ist das nicht-retardierte Potential proportional zu  $-1/r^6$  [20] und das retardierte proportional zu  $-1/r^7$  [21]. Für die singulären Potentiale (1.1) ist die Bewegung der Teilchen nicht nur für  $r \rightarrow \infty$  klassisch, sondern auch für “kleine” Abstände  $r$ . “Klein” bezieht sich hier auf einen Vergleich mit den typischen Längenskalen des Potentialschwanzes, die zwischen hunderte und tausende atomare Einheiten groß sein können [22]. Im Nahbereich von einigen atomaren Einheiten spielt die mikroskopische Struktur des Projektils bzw. des Targets eine große Rolle und die Wechselwirkung ist im Allgemeinen schwer zu beschreiben. Führt der kurzreichweitige Potentialanteil so effizient zu inelastischen Reaktionen wie “sticking”, dass wir totale Absorption annehmen können, liefert für verschwindende Energien die Quantenreflexion der  $s$ -Wellen den dominanten Beitrag zum Wirkungsquerschnitt. Der nächste Beitrag zum Wirkungsquerschnitt entsteht aus  $s$ - und  $p$ -Wellen, wobei es sich bei der  $p$ -Wellenstreuung nicht mehr um Quantenreflexion, sondern um eine klassisch erlaubte Reflexion handelt. Für die Potentiale (1.1) können wir mit Hilfe von einlaufenden Randbedingungen in Form von WKB-Wellen modellunabhängig totale Absorption beschreiben, da die WKB-Wellen für diese Potentiale im Limes  $r \rightarrow 0$  die radiale Schrödinger-Gleichung exakt lösen.

In dieser Arbeit erweitern wir obige Fragestellung auf den Fall der Streuung von ultrakalten Atomen an absorbierenden Nanokugeln. Wir werden zeigen, dass durch die Streuung an einer Kugel und die Berücksichtigung von  $p$ -Wellen bei einem Streuexperiment mehr Informationen aus dem Wirkungsquerschnitt gewonnen werden können als bei der Streuung von ultrakalten Atomen an einer Wand. Neben diesem drei-dimensionalen Problem betrachten wir auch die Streuung in zwei Dimensionen, die experimentell leichter, z.B. durch die Streuung an einem Draht oder Nanoröhrchen, zu verwirklichen ist. Wie für die Streuung an einer Wand werden in beiden Fällen die Streuphasen bei niedrigen Energien nur durch wenige Parameter beschrieben, die durch den asymptotischen Potentialschwanz bestimmt sind. Zur Berechnung dieser Parameter ist die Arbeit in drei Teile unterteilt:

Im ersten Abschnitt behandeln wir die theoretischen Grundlagen, die semiklassische WKB-Theorie und die Grenzen dieser Näherungsmethode. WKB-Wellen liefern uns die Möglichkeit, Tunnelprozesse und Quantenreflexion zu beschreiben, insbesondere in Schwellennähe. Die Quantenreflexion als dominanter Prozess in der  $s$ -Wellenstreuung wird anhand eines Experiments für die Streuung an einer leitenden Wand vorgestellt und die Grenzen derartiger Versuche werden erläutert.

Im zweiten Abschnitt betrachten wir die Streuung an radialsymmetrischen Potentialen in drei Dimensionen. Die radiale Schrödinger-Gleichung ist von der Drehimpulsquantenzahl  $l$  abhängig, die noch zusätzlich zum Wechselwirkungspotential einen Term proportional zu  $l(l+1)/r^2$  beinhaltet. Für  $l = 0$  verschwindet dieser Beitrag und die radiale Schrödinger-Gleichung entspricht formal der Schrödinger-Gleichung in einer Dimension, so dass es sich bei der Reflexion an den Potentialen (1.1) um Quantenreflexion handelt. Durch die einlaufenden Randbedingungen für  $r \rightarrow 0$  ist dies ein Prozess mit Teilchenverlust und die Streuphase  $\delta$  ist komplex. Diese Aussage gilt auch für die Streulänge  $\mathcal{A}$ , die den führenden Beitrag zur Streuphase beschreibt [23]. Das Schwellengesetz von Wigner ist im Allgemeinen nur für sehr kurzreichweitige Potentiale (die schneller abfallen als jede Potenz) gültig und muss für längerreichweitige Potentiale modifiziert werden. Für repulsive Potentiale proportional zu  $1/r^\alpha$ ,  $\alpha > 2$  ist das führende Verhalten der (reellen Streuphase) bereits bekannt und hängt im drei-dimensionalen Fall von der Potenz  $\alpha$  und der Drehimpulsquantenzahl  $l$  ab [24]:

$$\tan \delta_l(k) \propto \begin{cases} k^{2l+1} & \text{für } \alpha > 2l + 3, \\ k^{2l+1} \ln k & \text{für } \alpha = 2l + 3, \\ k^{\alpha-2} & \text{für } \alpha < 2l + 3. \end{cases} \quad (1.2)$$

Die nächsthöhere Ordnung in der Wellenzahl  $k$  hängt ebenfalls von  $\alpha$  und  $l$  ab und ist für Potentiale, die schneller abfallen als  $1/r^{2l+5}$ , proportional zu  $k^{2l+3}$  [25]. Für  $l = 0$  lässt sich dieser Term mit Hilfe der *effective-range Theorie* berechnen [26] und wird durch die (reelle) *effektive Reichweite*  $r_{\text{eff},0}$  bestimmt. Dies gilt auch für die attraktiven, singulären Potentiale (1.1), wobei hier dieser Term – wieder auf Grund des Teilchenverlustes – komplex ist und durch die komplexe effektive Reichweite  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}$  beschrieben wird.  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}$  leiten wir durch eine Anpassung der gewöhnlichen effective-range Theorie an den Fall der Quantenreflexion her und bestimmen diesen Ausdruck analytisch für homogene Potentiale proportional zu  $-1/r^\alpha$ . Für diese Potentiale untersuchen wir die höheren Partialwellen  $l > 0$  in Abschnitt 3.4, indem wir basierend auf den Arbeiten von del Giudice und Galzenati [27, 28] die Theorie der *Jost-Funktionen* auf den Fall der Streuung an attraktiven, singulären Potentialen mit einlaufenden Randbedingungen erweitern. Wir bestimmen mit einer geeigneten Entwicklung der *Jost-Lösungen* die führenden Beiträge der Streuphase für alle homogenen Potentiale, die schneller abfallen als  $1/r^2$ , und vervollständigen die Ergebnisse aus Abschnitt 3.3 für  $\alpha \leq 5$  und  $l = 0$ . Ein einfacher Zusammenhang zwischen den reellen Größen bei der Streuung an repulsiven Potentialen und den komplexen Größen bei der Streuung an attraktiven Potentialen wird deutlich. In Abschnitt 3.5 wenden wir die gewonnenen Ergebnisse auf den Fall der Streuung von ultrakalten Atomen an Nanokugeln an. Bei dieser Anwendung sind die Parameter so gewählt, dass sie der Streuung von metastabilen Helium ( $2^3S$ )-Atomen bzw. Natrium-Atomen im Grundzustand entsprechen und einen Temperaturbereich bis zu 500 nK abdecken. Für den Radius der Kugel haben wir 200 bzw. 2000 a.u. gewählt. Wie sich zeigt, ist der Radius der Kugel ein weiterer Parameter zur Untersuchung des Wechselwirkungspotentials. Als Grundlage dieses Abschnittes dienen die Arbeiten [23, 29, 30].

Die Streuung an rotationsinvarianten Potentialen in zwei Dimensionen wird im letzten Kapitel behandelt. In diesem Abschnitt erweitern wir die Ergebnisse aus Kapitel 3 auf den zwei-dimensionalen Fall, der sich insbesondere in der  $s$ -Wellenstreuung stark von den vorherigen Ergebnissen unterscheidet. Im Gegensatz zur drei-dimensionalen Streutheorie verschwindet das Zentrifugalpotential nie und ist für die  $s$ -Wellenstreuung sogar attraktiv. Dieses Verhalten beeinflusst entscheidend das Schwellenverhalten der Streuphase, die für  $k \rightarrow 0$  ein logarithmisches Verhalten aufweist. Nach den Grundlagen in Abschnitt 4.1 leiten wir analog zum drei-dimensionalen Fall eine Streulänge (die für Potentiale definiert ist, die schneller abfallen als  $-1/r^2$ ) und eine effektive Reichweite (für Potentiale, die schneller abfallen als  $-1/r^4$ ) sowohl für repulsive als auch attraktive Potentiale her, die mit der Definition von Verhaar *et al.* [31] übereinstimmt. Auch hier bestimmen wir beide Größen für den Fall der homogenen Potentiale (1.1) und können die Analogien zwischen den repulsiven und attraktiven Potentialen aus den vorherigen Abschnitten auch auf den Fall der zwei-dimensionalen Streuung übertragen. Für den Sonderfall  $\alpha = 4$  stellen wir eine modifizierte effective-range Entwicklung basierend auf Mathieu-Funktionen vor und berechnen die entsprechenden Größen analytisch. Zum Abschluss bestimmen wir – wie in Abschnitt 3.4 – die führenden Beiträge der Streuphase für höhere Partialwellen mit Hilfe der Jost-Funktionen analytisch. Die Grundlage für diesen Abschnitt ist die Arbeit [32].

Wir beenden die Arbeit mit einer Zusammenfassung und einem Ausblick. Im Anhang stellen wir das von uns verwendete Verfahren zur Lösung von Differentialgleichungen vor und leiten das Wechselwirkungspotential zwischen einem Atom und einer Wand bzw. Kugel her.



# Kapitel 2

## Grundlagen

### 2.1 Die WKB-Methode – eine semiklassische Approximation

Die Einführung der Quantenmechanik durch Schrödinger 1926 [33] stellte einen großen Umbruch in der Physik dar und stand im Gegensatz zur deterministischen Auffassung, die durch die klassische Mechanik geprägt wurde. In der Quantenmechanik wird der Zustand eines physikalischen Systems durch eine Wellenfunktion  $\Psi(\vec{r}, t)$  bestimmt, die im allgemeinsten Fall der *zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t) \quad (2.1)$$

genügen muss, wobei  $\hat{H}$  den *Hamilton-Operator* des Systems darstellt. Für zeitunabhängige Vorgänge reduziert sich diese Gleichung zur *zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung*

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}, t) = E \Psi(\vec{r}, t), \quad (2.2)$$

wobei  $E$  die zugehörige Energie des Systems ist. Noch im selben Jahr gaben Wentzel, Kramers und Brillouin [34–36] eine semiklassische Approximation zur Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung, die sogenannte WKB-Methode.<sup>1</sup> Sie stellt eine Verbindung zwischen der klassischen Mechanik und der Quantenmechanik her und liefert eine Möglichkeit, das Auftreten rein quantenmechanischer Effekte, wie z.B. die Quantenreflexion, zu beschreiben. Um diese Effekte untersuchen zu können, leiten wir im folgenden Abschnitt die WKB-Methode her und betrachten den klassischen bzw. antiklassischen Limes der Schrödinger-Gleichung. Weiter stellen wir einige Eigenschaften der WKB-Methode vor und behandeln die Grenzen dieser Näherung. Als Beispiel betrachten wir den experimentellen Nachweis und die Eigenschaften der Quantenreflexion im Fall der Streuung eines Teilchens an einer flachen Wand.

#### 2.1.1 Der klassische und antiklassische Limes der Schrödinger-Gleichung

Um eine Verbindung zwischen der klassischen Mechanik und der Quantenmechanik herzustellen, betrachten wir zunächst die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}} \Delta_{\vec{r}} + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \quad (2.3)$$

---

<sup>1</sup>Bereits zwei Jahre zuvor, 1924, entwickelte Jeffreys eine in großen Teilen zur WKB-Methode äquivalente Theorie [37], weshalb auch häufig von der JWKB-Methode gesprochen wird.

und suchen nach Lösungen der Form

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar} W(\vec{r}, t)\right), \quad (2.4)$$

wobei die Funktion  $W(\vec{r}, t)$  der Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} W(\vec{r}, t) + \frac{1}{2\mathcal{M}} (\nabla_{\vec{r}} W(\vec{r}, t))^2 + V(\vec{r}) - \frac{i\hbar}{2\mathcal{M}} \Delta_{\vec{r}} W(\vec{r}, t) = 0 \quad (2.5)$$

genügen muss. Definieren wir formal den klassischen Limes durch  $\hbar \rightarrow 0$ , so reduziert sich Gleichung (2.5) zur Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} W(\vec{r}, t) + H(\vec{r}, \vec{p}) = 0, \quad (2.6)$$

deren partikuläre Lösung vollständig eine klassische Trajektorie beschreibt. Für die stationären Energieeigenfunktionen  $\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \exp(-iEt/\hbar)$  kann der zeitabhängige Anteil von  $W(\vec{r}, t)$  durch den Ansatz

$$W(\vec{r}, t) = S(\vec{r}) - Et \quad (2.7)$$

absepariert werden, wodurch sich folgende Form von  $\psi(\vec{r})$  ergibt:

$$\psi(\vec{r}) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(\vec{r})\right). \quad (2.8)$$

Dieser Ausdruck, eingesetzt in Gleichung (2.5),

$$\frac{1}{2\mathcal{M}} (\nabla_{\vec{r}} S(\vec{r}))^2 - (E - V(\vec{r})) - \frac{i\hbar}{2\mathcal{M}} \Delta_{\vec{r}} S(\vec{r}) = 0, \quad (2.9)$$

liefert im klassischen Limes

$$\frac{1}{2\mathcal{M}} (\nabla_{\vec{r}} S(\vec{r}))^2 = E - V(\vec{r}), \quad (2.10)$$

aus der Hamilton's charakteristische Funktion  $S$  der klassischen Mechanik bestimmt werden kann [38].

Die Definition des klassischen Limes, " $\hbar \rightarrow 0$ ", wirft jedoch insofern ein Problem auf, dass es sich bei dem Plank'schen Wirkungsquantum  $\hbar$  um eine wohldefinierte Konstante handelt, die eine systemunabhängige Referenzgröße für die klassische Wirkung in dem zugehörigen klassischen System beschreibt. Somit ist die Definition " $\hbar \rightarrow 0$ " aus physikalischer Sicht nicht sinnvoll. Stattdessen sollte  $\hbar$  mit einer klassischen Wirkung  $S_c$ ,<sup>2</sup>

$$S_c = \int p(r) dr = \int \sqrt{2\mathcal{M}(E - V(r))} dr \quad (2.11)$$

verglichen werden, die vom lokalen klassischen Impuls  $p(r) = \sqrt{2\mathcal{M}(E - V(r))}$  abhängig ist. Quantenmechanische Effekte spielen dann eine Rolle, wenn die klassische Wirkung in der Größenordnung von oder sogar kleiner als  $\hbar$  ist und sich der "antiklassische Limes" bzw. "extrem quantenmechanische Limes" durch

$$S_c \ll \hbar \quad (2.12)$$

definieren lässt. Im Umkehrschluss hieraus gilt für den semiklassischen Limes [22]:

$$S_c \gg \hbar. \quad (2.13)$$

<sup>2</sup>Wir haben hier die Diskussion auf den für uns interessanten eindimensionalen Fall reduziert; analog kann im mehrdimensionalen Fall argumentiert werden.

### 2.1.2 Die WKB-Methode

Zur Herleitung der WKB-Methode betrachten wir die eindimensionale, zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung unter dem Einfluss eines (zeitunabhängigen) Potentials  $V(r)$ ,

$$\frac{d^2}{dr^2}\psi(r) + \frac{2\mathcal{M}}{\hbar^2}(E - V(r))\psi(r) = 0. \quad (2.14)$$

Setzen wir den Lösungsansatz (2.8) in diese Gleichung ein, erhalten wir eine Differentialgleichung zweiter Ordnung für  $S(r)$ :

$$S'^2(r) - i\hbar S''(r) = p^2(r). \quad (2.15)$$

Anstatt den Grenzwert  $\hbar \rightarrow 0$  zu bilden, entwickeln wir  $S(r)$  formal nach dem Parameter  $\hbar$ , den wir im Sinne einer semiklassischen Näherung als eine kleine Störung betrachten wollen:

$$S(r) = S_0(r) + \frac{\hbar}{i}S_1(r) + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2(r) \dots \quad (2.16)$$

Dieser Ausdruck, eingesetzt in (2.15), und geordnet nach Potenzen von  $\hbar$ ,

$$p^2(r) - S_0'^2(r) + i\hbar(S_0''(r) + 2S_0(r)'S_1'(r)) + \hbar^2(S_1''(r) + 2S_0'(r)S_2'(r) + S_1'^2(r)) \dots = 0, \quad (2.17)$$

kann nur dann gelöst werden, wenn alle Terme der Ordnung  $\mathcal{O}(\hbar^n)$  unabhängig voneinander verschwinden. Mit dieser Bedingung lassen sich die  $S_n(r)$  iterativ bestimmen und für  $n = 0$  folgt:

$$S_0'(r) = \pm p(r) \quad \Rightarrow \quad S_0(r) = \pm \int p(r)dr. \quad (2.18)$$

Der Term in erster Ordnung von  $\hbar$  liefert:

$$S_1'(r) = -\frac{S_0''(r)}{2S_0'(r)} = -\frac{p'(r)}{2p(r)} \quad \Rightarrow \quad S_1(r) = -\frac{1}{2} \ln p(r), \quad (2.19)$$

und somit für Gleichung (2.16)<sup>3</sup>

$$S(r) = \pm \int p(r)dr - \left(\frac{\hbar}{i}\right) \frac{1}{2} \ln p(r) + \mathcal{O}(\hbar^2). \quad (2.20)$$

Mit Gleichung (2.8) können wir die WKB-Wellenfunktion definieren,

$$\psi_{\text{WKB}}(r) = \frac{C_1}{\sqrt{p(r)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{r_0}^r p(r')dr'\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p(r)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{r_0}^r p(r')dr'\right), \quad (2.21)$$

wobei  $C_1$  und  $C_2$  beliebige komplexe Konstanten sind. Zu beachten ist hierbei, dass der lokale klassische Impuls  $p(r)$  sowohl reell als auch imaginär sein kann, je nachdem, ob die Wellenfunktion in einem klassisch erlaubten oder klassisch verbotenen Bereich betrachtet wird. Die Wahl von  $r_0$  ist prinzipiell beliebig, häufig wird jedoch für  $r_0$  der klassische Umkehrpunkt  $r_t$  gewählt, d.h. der Punkt, für den die gesamte Energie gleich der potentiellen ist,  $E = V(r_t)$ . Gleichung (2.21) stellt im klassisch erlaubten Bereich eine Überlagerung von

<sup>3</sup>Eine Fortsetzung dieser Entwicklung ist nicht unbedingt sinnvoll, da die Entwicklung in (2.16) asymptotisch ist und nicht konvergiert. Durch Berücksichtigung von mehr Termen kann eventuell ein schlechteres Ergebnis erreicht werden [22].

nach links bzw. nach rechts laufenden Wellen dar und kann alternativ durch eine Sinus- bzw. Kosinus-Funktion mit einer geeigneten Phase  $\phi$  zusammengefasst werden:

$$\psi_{\text{WKB}}(r) \propto \frac{1}{\sqrt{p(r)}} \cos \left( \left| \frac{1}{\hbar} \int_{r_0}^r p(r') dr' \right| - \frac{\phi}{2} \right). \quad (2.22)$$

Die *Reflexionsphase*  $\phi$  beschreibt den Phasenverlust der WKB-Wellenfunktion, der bei Reflexion auftritt.

Da die WKB-Methode nur eine approximative Lösung der Schrödinger-Gleichung darstellt, ist es wichtig, die Güte dieser Näherung zu untersuchen, um quantitative Aussagen treffen zu können. So divergiert z.B. die Wellenfunktion (2.21) unphysikalisch am klassischen Umkehrpunkt  $r_t$ , da hier  $p(r_t) = 0$  ist. Neben diesem offensichtlichen Punkt existieren (meistens) noch ganze Regionen im Ortsraum, in denen die WKB-Welle die exakte Lösung der Schrödinger-Gleichung nur unzureichend wiedergibt. Ein gängiges Kriterium für die Güte liefert die Bedingung

$$|\hbar S''(r)| \ll |S'^2(r)|, \quad (2.23)$$

die besagt, dass die de Broglie Wellenlänge  $\lambda(r) = 2\pi\hbar/p(r)$  nur langsam variiert:

$$\frac{1}{2\pi} \left| \frac{d}{dr} \lambda(r) \right| \ll 1. \quad (2.24)$$

Sinnvoller jedoch ist es, das Verhalten der WKB-Lösung im Fall der Schrödinger-Gleichung zu untersuchen, die eingesetzt in Gleichung (2.14)

$$\psi_{\text{WKB}}''(r) + \frac{p^2(r)}{\hbar^2} \psi_{\text{WKB}}(r) - \left( \frac{3p'^2(r)}{4p^2(r)} - \frac{p''(r)}{2p(r)} \right) \psi_{\text{WKB}}(r) = 0 \quad (2.25)$$

liefert. Hier tritt ein zusätzlicher Term im Vergleich zur Schrödinger-Gleichung auf, der für den Fall einer guten Approximation durch die WKB-Funktion gegenüber dem zweiten Term klein sein muss. Definieren wir die *Quantalitätsfunktion*  $Q(r)$  (auch *Badlandsfunktion* [13, 39, 40]) durch

$$Q(r) = \hbar^2 \left( \frac{3p'^2(r)}{4p^4(r)} - \frac{p''(r)}{2p^3(r)} \right), \quad (2.26)$$

so ist die WKB-Approximation dann gut, falls gilt:

$$|Q(r)| \ll 1. \quad (2.27)$$

Dies ist gleichbedeutend damit, dass in diesen Gebieten ein semiklassischer Bereich vorliegt. Gebiete, in denen die Bedingung (2.27) verletzt wird, sind extrem quantenmechanische Regionen.

Der Vorteil dieses Kriteriums gegenüber (2.24) wird deutlich, wenn wir das Potential

$$V(r) = \frac{1}{(ar + b)^4} \quad (2.28)$$

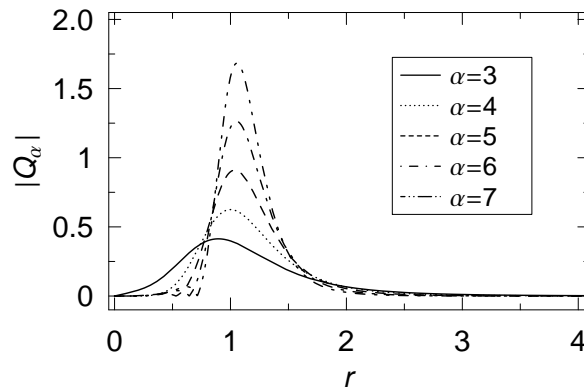
betrachten. Während bei Energie  $E = 0$  Gleichung (2.24) für  $r \rightarrow \infty$  divergiert, zeigt jedoch die Quantalitätsfunktion, dass die WKB-Funktion nicht nur eine gute Näherung liefert, sondern sogar exakt ist.

Für homogene, attraktive, singuläre Potentiale

$$V_\alpha(r) = -\frac{C_\alpha}{r^\alpha} = -\frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}} \frac{\beta_\alpha^{\alpha-2}}{r^\alpha}, \quad (2.29)$$

$$\beta_\alpha = \left( \frac{2\mathcal{M}}{\hbar^2} C_\alpha \right)^{1/(\alpha-2)}, \quad (2.30)$$





**Abbildung 2.1:** Quantalitätsfunktion  $|Q_\alpha(r)|$  aus Gleichung (2.31) für  $\alpha = 3$  bis  $\alpha = 7$  mit  $k = \beta = 1$ . In allen Fällen konvergiert  $|Q_\alpha(r)|$  für  $r \rightarrow 0$  und  $r \rightarrow \infty$  gegen 0 (die semiklassischen Bereiche) und es existiert ein quantenmechanischer Bereich, in dem  $|Q_\alpha(r)|$  wesentlich von Null verschieden ist.

mit dem Stärkeparameter  $C_\alpha$  und der charakteristischen Länge  $\beta_\alpha$  – sie gibt eine Skala für quantenmechanische Effekte an [22] – ist die Quantalitätsfunktion  $Q_\alpha(r)$

$$Q_\alpha(r) = \frac{5\alpha^2\beta_\alpha^{2\alpha-4}}{16r^{2\alpha+2}(k^2 + \beta_\alpha^{\alpha-2}/r^\alpha)^3} - \frac{\alpha(\alpha+1)\beta_\alpha^{\alpha-2}}{4r^{\alpha+2}(k^2 + \beta_\alpha^{\alpha-2}/r^\alpha)^2}, \quad (2.31)$$

und nimmt für  $E = 0$  die einfache Form

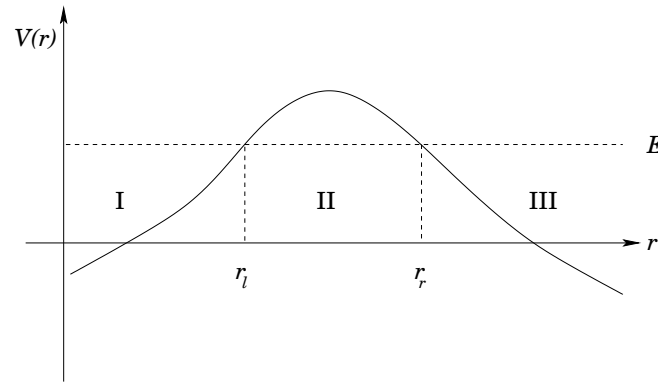
$$Q_\alpha(r) \propto \frac{\alpha}{4} \left(1 - \frac{\alpha}{4}\right) r^{\alpha-2} \quad (2.32)$$

an. Bedingung (2.27) ist für  $r \rightarrow 0$  für  $\alpha > 2$  erfüllt, wohingegen für  $\alpha < 2$ ,  $r \rightarrow \infty$  gefordert werden muss. Ausnahmen bilden der Fall  $\alpha = 4$ , für den  $Q_4(r) \equiv 0$  ist, also der ganze Ortsraum semiklassisch ist, und  $\alpha = 2$ , für den  $Q_2(r) = \text{const.}$  ist, also unabhängig von  $r$  kein semiklassischer Bereich vorliegt.

Im Allgemeinen können wir für die Potentiale (2.29), analog zu den Gleichungen (2.12) und (2.13), Bedingungen für den semiklassischen und antiklassischen Limes aufstellen: für eine endliche Energie  $E$  und  $\alpha > 2$  ( $\alpha < 2$ ) bedeutet  $k\beta_\alpha \rightarrow \infty$  ( $k\beta_\alpha \rightarrow 0$ ) der semiklassische Limes, wohingegen  $k\beta_\alpha \rightarrow 0$  ( $k\beta_\alpha \rightarrow \infty$ ) der antiklassische Limes ist. Abbildung 2.1 zeigt  $|Q_\alpha(r)|$  aus Gleichung (2.31) für verschiedene  $\alpha$ -Werte als Funktion von  $r$ , wobei die Parameter  $k = \beta = 1$  gesetzt wurden. Sowohl im Limes  $r \rightarrow 0$  als auch für  $r \rightarrow \infty$  ist  $|Q_\alpha(r)| = 0$ , so dass hier semiklassische Gebiete vorliegen und die WKB-Näherung angesetzt werden kann. Im Zwischenbereich ist die Bedingung (2.27) verletzt, es handelt sich also um einen quantenmechanischen Bereich.

## 2.2 Transmission, Reflexion und Quantenreflexion

Die WKB-Methode stellt nicht nur ein Verfahren zum Lösen der Schrödinger-Gleichung zur Verfügung, sondern mit ihr lassen sich auch quantenmechanische Eigenschaften, wie z.B. Transmission, Reflexion und Quantenreflexion beschreiben. Betrachten wir hierfür die eindimensionale Bewegung eines Teilchen der Masse  $\mathcal{M}$  und der Energie  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mathcal{M}}$  unter dem Einfluss eines beliebigen Feldes, welches durch ein Potential  $V(r)$  repräsentiert wird (s. Abbildung 2.2, [41]). In diesem Beispiel kann der Ortsraum in drei Bereiche unterteilt



**Abbildung 2.2:** Ein Teilchen der Energie  $E$  unter dem Einfluss eines beliebigen Potentials  $V(r)$ . Die Bereiche I und III sind klassische erlaubte Bereiche, wohingegen Bereich II einen klassisch verbotenen Bereich darstellt.  $r_l$  und  $r_r$  sind die klassischen Umkehrpunkte.

werden: die klassisch erlaubten Bereiche I und III, sowie der klassisch verbotene Bereich II; die Punkte  $r_l$  und  $r_r$  sind die klassischen Umkehrpunkte, für die  $E = V$  gilt. In der klassischen Mechanik ist die Potentialbarriere genau dann für das Teilchen undurchdringlich, wenn seine Energie  $E$  kleiner als die potentielle Energie  $V$  ist. D.h. die Wahrscheinlichkeit  $P_R$ , dass das Teilchen reflektiert wird, ist 1. Im Gegensatz hierzu kann in der Quantenmechanik das Teilchen mit einer von Null verschiedenen Wahrscheinlichkeit  $P_T$  die Potentialbarriere überwinden, selbst wenn seine Energie kleiner ist als  $V$ ; diese Eigenschaft wird *Tunneleffekt* genannt. Die Reflexions- und Transmissionswahrscheinlichkeiten werden durch die Gleichung

$$P_R + P_T = 1 \quad (2.33)$$

miteinander verknüpft. Die Begriffe *Transmission* und *Reflexion* sind nur dann sinnvoll definierbar, wenn eine Bewegungsrichtung des Teilchens festgelegt werden kann. In diesem Fall spricht man von einer einlaufenden, transmittierten bzw. reflektierten Welle. Diese Festlegung ist nur in einem klassisch erlaubten semiklassischen Bereich möglich, innerhalb eines klassisch verbotenen Bereichs ist die Definition einer Bewegungsrichtung der Teilchen nicht möglich.

Zur Bestimmung von  $P_R$  bzw.  $P_T$  setzen wir für ein von rechts einlaufendes Teilchen im Bereich III einlaufende und reflektierte freie Wellen, und im Bereich I eine transmittierte WKB-Wellenfunktion an

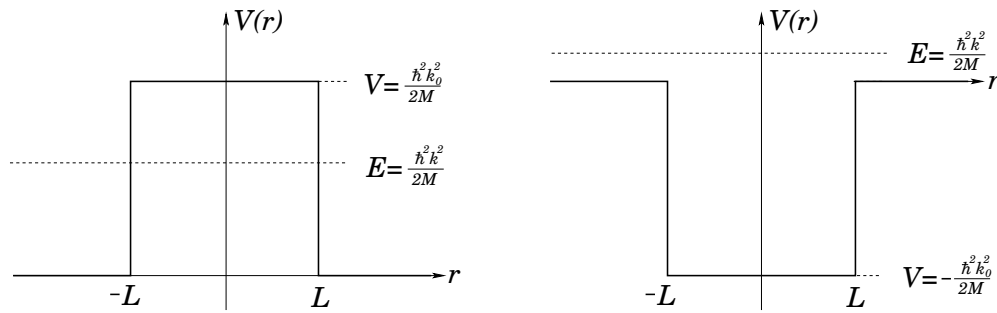
$$\psi_{\text{III}}(r) \sim \frac{1}{\sqrt{p(r)}} \left( \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{r_r}^r p(r') dr'\right) + R_r \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{r_r}^r p(r') dr'\right) \right), \quad (2.34a)$$

$$\psi_{\text{I}}(r) \sim \frac{T_r}{\sqrt{p(r)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{r_l}^r p(r') dr'\right), \quad (2.34b)$$

mit dem Reflexionskoeffizient  $R_r$  und dem Transmissionskoeffizient  $T_r$ .  $r_l$  und  $r_r$  sind Referenzpunkte, an denen die Phase der WKB-Wellenfunktion verschwindet.<sup>4</sup>  $P_T$  (bzw.  $P_R$ ) ist das Betragsquadrat des Transmissionskoeffizienten  $T$  (bzw. des Reflexionskoeffizienten  $R$ ):

$$P_T = |T|^2, \quad \text{bzw.} \quad P_R = |R|^2. \quad (2.35)$$

<sup>4</sup>Für ein Teilchen, das von links auf die Potentialbarriere trifft, lassen sich mit Hilfe der *Reziprozitätsrelation*,  $T_r = T_l \stackrel{\text{Def.}}{=} T$ ,  $R_r = -R_l^* T/T^*$ , die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten aus dem obigen Fall bestimmen [42]. In dieser Arbeit betrachten wir ausschließlich von rechts einlaufende Teilchen und verzichten zukünftig auf die Indizes  $r$  und  $l$ .



**Abbildung 2.3:** Schematische Darstellung der Potentialbarriere und des Potentialtopfs.

An dieser Stelle sei noch erwähnt, dass die Definition der Reflexion bzw. Transmission durch WKB-Wellenfunktionen keine semiklassische Näherung beinhaltet. Vielmehr muss zunächst die Schrödinger-Gleichung exakt gelöst werden, um dann die einkommende und reflektierte bzw. die transmittierte Welle an diese Lösung anzupassen [22].

Das einfachste Beispiel für den Tunneffekt ist die Potentialbarriere (s. Abbildung 2.3) mit dem Potential

$$V(r) = \begin{cases} \frac{\hbar^2 k_0^2}{2M} & \text{für } |r| \leq L, \\ 0 & \text{für } r > L, \end{cases} \quad (2.36)$$

für das die Schrödinger-Gleichung mit den Randbedingungen (2.34) gelöst werden muss. Die gesuchten Reflexions- und Transmissionswahrscheinlichkeiten werden in vielen Lehrbüchern (z.B. [43]) aufgeführt, so dass wir uns hier nur auf das Ergebnis beschränken. Mit den Abkürzungen

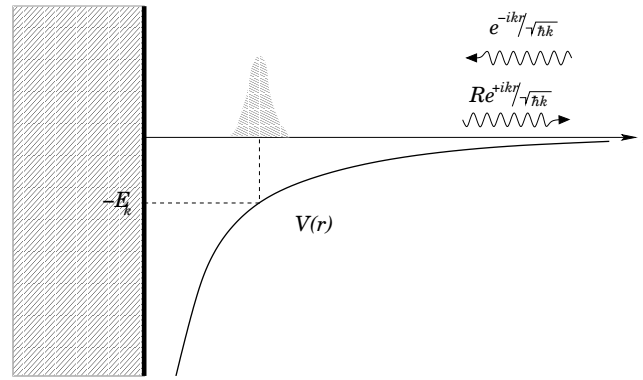
$$x = \sqrt{\frac{k_0^2 - k^2}{k^2}}, \quad \text{und} \quad \kappa = kx \quad (2.37)$$

folgt aus der Stetigkeit der Wellenfunktion und deren Ableitung an der Stelle  $r = \pm L$  für  $P_R$  und  $P_T$ :

$$P_T = \frac{4x^2}{4x^2 + (1 + x^2)^2 \sinh^2(2\kappa L)} \quad \text{und} \quad P_R = \frac{(1 + x^2)^2 \sinh^2(2\kappa L)}{4x^2 + (1 + x^2)^2 \sinh^2(2\kappa L)}. \quad (2.38)$$

Die Voraussetzung für den Tunnelprozess ist die Existenz eines klassischen Umkehrpunktes, d.h. dass die Energie  $E$  des einfallenden Teilchens kleiner ist als das Potential  $V$ . Aber nicht nur in diesem Fall treten Reflexion und Transmission auf, sondern auch, wenn die Energie größer ist als die Potentialbarriere. In der klassischen Mechanik gilt  $P_T = 1$ , wohingegen im quantenmechanischen Fall das Teilchen mit einer von Null verschiedenen Wahrscheinlichkeit reflektiert wird. Dieser Effekt findet sogar dann statt, wenn das Potential nicht repulsiv sondern attraktiv ist. Dieser kontraintuitive Prozess wird als *Quantenreflexion* bezeichnet und beschreibt die klassisch verbotene Reflexion eines Teilchens in einem klassisch erlaubten Gebiet ohne klassischen Umkehrpunkt. Eine Besonderheit der Quantenreflexion liegt darin, dass sie für kleine Energien  $E \rightarrow 0$  den dominanten Prozess bei der Streuung an attraktiven Potentialen darstellt, da die Reflexionswahrscheinlichkeit  $P_R$  für  $E \rightarrow 0$  gegen 1 strebt.

Da die Quantenreflexion ein rein quantenmechanischer Prozess ist, findet sie in den nicht-klassischen Gebieten des Potentials statt, also den Gebieten, in denen die Quantalitätsbeding-



**Abbildung 2.4:** Zur näherungsweise Bestimmung von  $r_{\max}$  aus Gleichung (2.39) ist der Punkt gesucht, an dem der Betrag der potentiellen Energie gleich der gesamten Energie ist. Das gestrichelte Gebiet stellt die Region dar, an dem  $|Q(r)|$  wesentlich von Null verschieden ist und somit eine Region hoher Quantalität vorliegt.

ung (2.27) verletzt ist. Das Gebiet um den Ort  $r_{\max}$ , an dem Quantenreflexion stattfindet, kann näherungsweise durch das Maximum in Gleichung (2.24) bestimmt werden [14], das sich aus der einfachen Abschätzung

$$|V(r_{\max})| \approx E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mathcal{M}} \quad (2.39)$$

berechnen lässt (s. Abbildung 2.4). Eine genauere und zuverlässigere Methode liefert jedoch die Bestimmung des Maximums der Quantalitätsfunktion  $Q(r)$  [13].

Das Verfahren zur Bestimmung von  $P_R$  und  $P_T$  ist identisch zu der Methode, die für den Tunnelprozess verwendet wurde. Auch hier muss die Schrödinger-Gleichung mit den Randbedingungen (2.34) gelöst werden. Zuvor ist sicherzustellen, dass in dem Potential zwei semiklassische Gebiete vorliegen, die durch einen Bereich mit hoher Quantalität voneinander getrennt sind. Auch hier gilt wieder, dass es sich bei dem Ansatz nicht um eine semiklassische Näherung handelt, da die einlaufende und reflektierte WKB-Wellenfunktion an eine exakte Lösung der Schrödinger-Gleichung angepasst werden muss.

Ebenso wie beim Tunneleffekt kann die Quantenreflexion an einem einfachen Beispiel, dem attraktiven Potentialtopf (s. Abbildung 2.3)

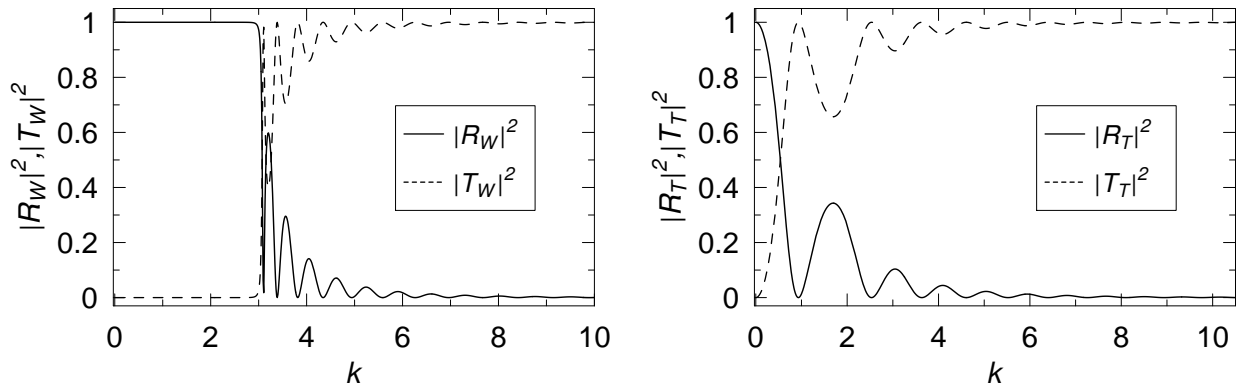
$$V(r) = \begin{cases} -\frac{\hbar^2 k_0^2}{2\mathcal{M}} & \text{für } |r| \leq L, \\ 0 & \text{für } r > L, \end{cases} \quad (2.40)$$

verdeutlicht werden. Die zwei ausgezeichneten Punkte in diesem Beispiel sind die Unstetigkeiten des Potentials an den Stellen  $r = \pm L$ . Diese stellen die einzigen Punkte dar, an denen  $Q(r)$  nicht verschwindet. Sie sind die quantenmechanischen Bereiche des Potentials, an denen Quantenreflexion stattfindet. Auch hier ist das Lösungsverfahren in vielen Büchern beschrieben (z.B. [43]) und mit den Abkürzungen

$$x = \sqrt{\frac{k_0^2 + k^2}{k^2}} \quad \text{und} \quad y^2 = 16x^2 + 4(1 - x^2)^2 \sin^2(2k_0 L) \quad (2.41)$$

erhalten wir:

$$P_T = \frac{16x^2}{y^2} \quad \text{und} \quad P_R = \frac{4(1 - x^2)^2 \sin^2(2k_0 L)}{y^2}. \quad (2.42)$$



**Abbildung 2.5:** Reflexionswahrscheinlichkeit  $|R_{W,T}|^2$  (durchgezogene Linie) und Transmissionwahrscheinlichkeit  $|T_{W,T}|^2$  (gestrichelte Linie) für die Potentialbarriere (2.36) (linkes Bild) und den Potentialtopf (2.40) (rechtes Bild) als Funktion von  $k$  mit den Parametern  $k_0 = 3$  und  $L = 2$ . In beiden Fällen liegt für  $k = 0$  Totalreflexion vor, bei der Quantenreflexion fällt die Reflexionswahrscheinlichkeit jedoch bedeutend schneller ab als beim Tunnelprozess. In beiden Fällen treten auf Grund von Resonanzen Oszillationen auf.

Abbildung 2.5 zeigt die Reflexion (durchgezogene Linie) bzw. Transmission (gestrichelte Linie) für den Tunnelprozess (2.38) (linkes Bild) sowie für die Quantenreflexion (rechtes Bild) an der Potentialbarriere bzw. am Potentialtopf mit den Parametern  $k_0 = 3$  und  $L = 2$  als Funktion von  $k$ . Der Übergang vom Tunnelprozess zur Quantenreflexion für  $k > 3$  im linken Bild ist deutlich erkennbar. Für hinreichend große Energien treten in beiden Fällen Resonanzen auf, die das oszillatorische Verhalten erklären.

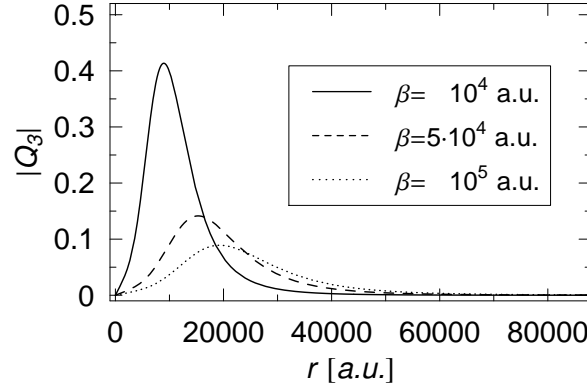
### 2.2.1 Quantenreflexion an attraktiven, singulären Potentialen

Nachdem wir die grundlegenden Begriffe an den Beispielen Potentialtopf und -barriere verdeutlicht haben, wenden wir uns nun den realistischeren homogenen, attraktiven, singulären Potentialen der Form  $-1/r^\alpha$  zu. Potentiale dieser Art beschreiben das asymptotische Verhalten der Wechselwirkung zwischen Atomen bzw. Molekülen mit Oberflächen und untereinander. Für  $\alpha = 1$  ist dies das Coulomb-Potential, für  $\alpha = 3$  und  $\alpha = 4$  das van der Waals-Potential bzw. das retardierte Casimir-Polder-Potential, welches bei der Wechselwirkung von polarisierbaren Atomen mit einer leitenden Wand auftritt. Das Potential zwischen zwei polarisierbaren Atomen bzw. zwischen einem polarisierbaren Atom und einer leitenden Kugel wird im nicht-retardierten Fall durch  $\alpha = 6$ , im retardierten Fall durch  $\alpha = 7$  beschrieben.

Wie oben bereits erwähnt, benötigen wir für das Auftreten von Quantenreflexion zwei semiklassische Bereiche, in denen WKB-Wellenfunktionen angesetzt werden können, die durch einen extrem quantenmechanischen Bereich voneinander getrennt sind. Diese Voraussetzung kann weder das Coulomb-Potential noch das Potential  $-1/r^2$  erfüllen,<sup>5</sup> so dass wir uns im Folgenden auf Potentiale der Form

$$V_\alpha(r) = -\frac{C_\alpha}{r^\alpha} = -\frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}} \frac{\beta_\alpha^{\alpha-2}}{r^\alpha}, \quad \alpha > 2 \quad (2.43)$$

<sup>5</sup>In beiden Fällen kann keine WKB-Wellenfunktion für  $r \rightarrow 0$  angesetzt werden, da  $|Q(r)|$  nach Gleichung (2.32) nicht verschwindet.



**Abbildung 2.6:** Quantalitätsfunktion  $|Q_3(r)|$  für ein van der Waals-Potential  $-\beta_3/r^3$  bei konstanter Energie mit verschiedenen  $\beta_3$ -Werten als Funktion von  $r$ . Die Energie entspricht für Helium etwa einer Temperatur von 144 nK. Für kleinere  $\beta$ -Werte nimmt das Maximum zu, verschiebt sich aber näher an den Ursprung.

beschränken, für die das Maximum der Quantalitätsfunktion  $Q_\alpha(r)$  aus (2.31) analytisch bestimmt werden [13] kann:

$$r_{\max} = F(\alpha)^{1/\alpha} k^{-2/\alpha} \beta_\alpha^{1-2/\alpha}, \quad (2.44)$$

$$F(\alpha) = \frac{5}{4} - \frac{9}{2\alpha + 4} \pm \frac{9\alpha}{4\alpha + 8} \sqrt{1 - \frac{20}{27} \left( \frac{\alpha + 2}{\alpha + 1} \right)}. \quad (2.45)$$

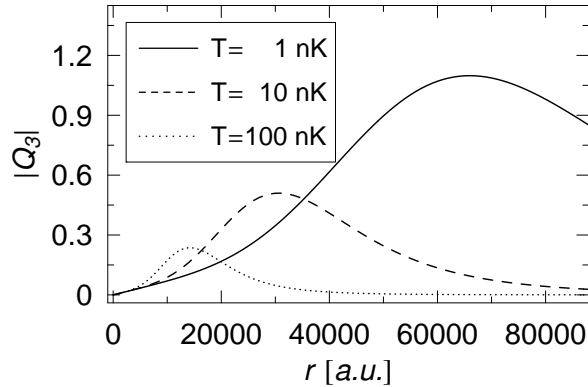
Mit Gleichung (2.31) kann gefolgert werden, dass das Maximum von  $|Q_\alpha(r)|$  für ein schwächeres Potential (d.h. kleinere  $\beta_\alpha$ -Werte) im Vergleich zu einem stärkeren Potential bei gleicher Energie zunimmt. Allerdings wird das Maximum von  $|Q_\alpha(r)|$  immer näher an den Ursprung geschoben (vgl. Gleichung (2.44)). Bereiche mit höherer Quantalität bedeuten aber auch, dass die Reflexionswahrscheinlichkeit  $P_R$  zunimmt, in Übereinstimmung mit den Ergebnissen in [14].

Abbildung 2.6 zeigt das Verhalten von  $|Q_3(r)|$  für ein van der Waals-Potential  $-\beta_3/r^3$  bei konstanter Energie  $E$  als Funktion des Ortes  $r$  (in atomaren Einheiten). In diesem Beispiel entspricht die Energie der kinetischen Energie von kalten Helium-Atomen bei etwa 144 nK. Weiter folgt aus Gleichung (2.31), dass für kleine Energien bzw. Temperaturen das Maximum der Quantalitätsfunktion und somit die Reflexionswahrscheinlichkeit zunimmt. Im Limes  $k \rightarrow 0$  strebt  $P_R$  gegen 1 und  $r_{\max}$  wandert immer weiter nach außen. Abbildung 2.7 zeigt  $|Q_3(r)|$  als Funktion von  $r$  (in atomaren Einheiten) für verschiedene Temperaturen. Der Parameter  $\beta_3 = 27740$  a.u. [44] ist so gewählt, dass die Ergebnisse den Werten für metastabiles Helium  $\text{He}(2^3S)$  vor einer perfekt leitenden Wand entsprechen.

Eine weitere wichtige Eigenschaft ist die Lage des Maximums. Da die  $\beta_\alpha$ -Werte im Allgemeinen Längen von einigen tausend bis hunderttausend atomaren Einheiten sind, ist  $r_{\max}$  ebenso einige tausend atomare Einheiten vom Ursprung entfernt. Quantenreflexion findet also weit vor dem Bereich kleiner Abstände statt, in dem die komplizierten Atom-Oberflächen-Prozesse stattfinden, die nur sehr schwer theoretisch beschreibbar sind.

## 2.2.2 Nachweis der Quantenreflexion im Experiment

Quantenreflexion experimentell nachzuweisen ist äußerst schwierig, da zwar die Reflexionswahrscheinlichkeit für Energien  $E \rightarrow 0$  und somit für Temperaturen  $T \rightarrow 0$  gegen 1 strebt,



**Abbildung 2.7:**  $|Q_3(r)|$  für ein van der Waals-Potential  $-\beta_3/r^3$  für verschiedene Temperaturen als Funktion von  $r$ . Der Parameter  $\beta_3$  entspricht dem Wert für metastabiles Helium  $\text{He}(2^3S)$  vor einer leitenden Wand. Für kleinere Temperaturen nimmt das Maximum von  $|Q_3(r)|$  zu, wandert jedoch weiter nach außen.

aber exponentiell abfällt [11–14, 45–54]. Um einen experimentell messbaren Wert für die Reflexionswahrscheinlichkeit zu erhalten, ist es unabdingbar, die Energie der zu streuenden Atome in Bereiche von  $\mu\text{K}$  und darunter abzukühlen. Dieser Temperaturbereich wird mit Hilfe von magnetooptischen Fallen (MOT) erreicht, die zur Erzeugung von Bose-Einstein-Kondensaten (BEC) benutzt werden, z.B. [55]. Das einfachste Experiment dieser Art ist die Streuung ultrakalter Atome an einer flachen Wand, bei dem Quantenreflexion nachgewiesen werden konnte.<sup>6</sup> Das rechte Bild in Abbildung 2.8 zeigt schematisch den Aufbau eines Experiments, bei dem metastabile  $\text{Ne}^*$ -Atome an einer Siliziumoberfläche gestreut werden [11]. Hierfür werden angeregte  $\text{Ne}^*$ -Atome im  $1s_5[{}^3P_2]$  Zustand in einer MOT abgekühlt und mit Hilfe eines 598 nm Lasers in den  $1s_3$  Zustände gepumpt. Nach dem Abschalten der Falle befinden sich die Atome im freien Fall und treffen auf einen Si-Kristall, an dem sie reflektiert werden. Der Einfallswinkel der Atome ist möglichst klein gewählt, um ihre kinetische Energie senkrecht zur Wand weiter zu reduzieren und die Reflexionswahrscheinlichkeit zu erhöhen. Der He-Ne-Laser dient zur Bestimmung des Winkels des Kristalls im Vergleich zum Einfallswinkel der Teilchen. Das linke Bild in Abbildung 2.8 ist die gemessene Reflexionswahrscheinlichkeit  $P_R$  als Funktion der Geschwindigkeit senkrecht zum Silizium-Kristall in einer logarithmischen Skala aufgetragen und bestätigt den linearen Abfall für kleine Energien.<sup>7</sup> Die durchgezogene Linie zeigt die numerische Berechnung der Quantenreflexion für ein Potential, dass sich asymptotisch (für  $r \rightarrow 0$ ) wie ein van der Waals-Potential bzw. wie ein Casimir-Polder-Potential (für  $r \rightarrow \infty$ ) [19] verhält:

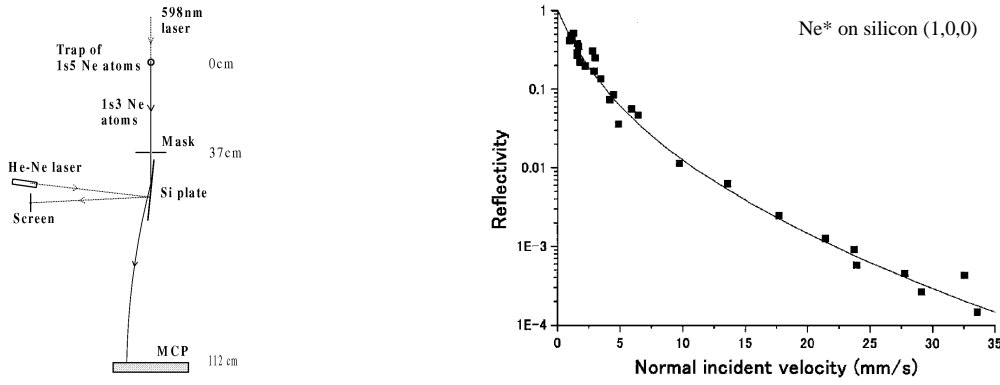
$$V(r) = \begin{cases} -C_3/r^3 & \text{für } r \rightarrow 0, \\ -C_4/r^4 & \text{für } r \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (2.46)$$

Im Bereich zwischen beiden Grenzwerten kann ein stetiger Übergang zwischen dem  $-1/r^3$  und  $-1/r^4$ -Potential erwartet werden, den Shimizu mit Hilfe des Potentials

$$V(r) = -\frac{C_4}{(r + \lambda/2\pi)r^3} \quad (2.47)$$

<sup>6</sup>Aufwendigere Experimente an strukturierten Oberflächen oder einem dünnen Draht sind bereits durchgeführt worden oder sind in Planung [17, 56].

<sup>7</sup>Aktuellere Messungen zeigen, dass der Wert  $P_R = 1$  für  $k \rightarrow 0$  nicht erreicht werden kann. Eine mögliche Erklärung hierfür ist die Struktur der Falle bzw. des BEC's [57, 58].



**Abbildung 2.8:** Experimenteller Nachweis von Quantenreflexion durch Streuung von metastabilen  $\text{Ne}^*$ -Atomen an einer Siliziumoberfläche [11].

beschreibt.  $\lambda$  ist die effektive Wellenlänge eines charakteristischen atomaren Übergangs. Die Koeffizienten  $C_3$  und  $C_4$  hängen von der Polarisierbarkeit des Atoms sowie von den dielektrischen Eigenschaften der (flachen) Wand ab. Diese berechnen sich z.B. für eine leitende Oberfläche und ein Atom im sphärischen Zustand  $|\psi_0\rangle$  aus

$$C_3 = \frac{\langle \psi_0 | \hat{\mathbf{d}}^2 | \psi_0 \rangle}{12} = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \alpha_d(i\omega) d\omega \quad (2.48)$$

und

$$C_4 = \frac{3}{8\pi} \frac{\alpha_d(0)}{\alpha_{fs}}, \quad (2.49)$$

wobei  $\alpha_d$  die Dipol-Polarisierbarkeit des Atoms und  $\alpha_{fs}$  die Feinstrukturkonstante ist [59, 60]. Die Randbedingungen zum Lösen der Schrödinger-Gleichung entsprechen denen aus Gleichung (2.34).

## 2.3 Der Einfluss der Retardierung auf die Streuung von Atomen

Die gemessene Reflektivität in Abbildung 2.8 kann nicht durch ein reines van der Waals-Potential wiedergegeben werden, vielmehr muss das Casimir-Polder-Potential, das Retardierungseffekte berücksichtigt, für eine gute Beschreibung der Ergebnisse verwendet werden. Den Einfluss dieser Effekte auf  $R$  untersuchten Friedrich *et al.* [13] und führten eine energieunabhängige Längenskala  $L$  ein,

$$L = \frac{C_4}{C_3} = \frac{(\beta_4)^2}{\beta_3}, \quad (2.50)$$

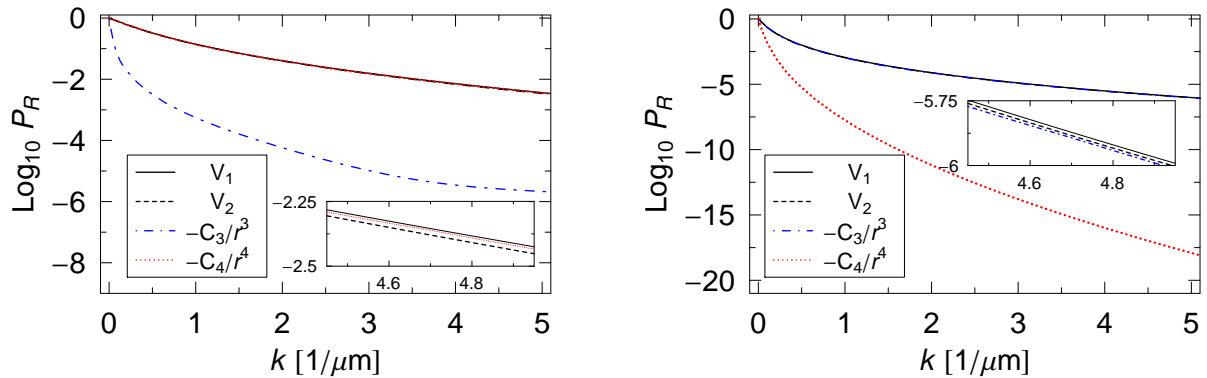
die das Regime kleiner  $r$ -Werte, also dem van der Waals-Regime,  $r \ll L$ , von dem Casimir-Polder-Regime großer  $r$ -Werte,  $r \gg L$ , trennt. Gleichung (2.47) kann durch diese Längenskala mit Hilfe einer Shape-Funktion  $v_{\text{shape}}(r/L)$  ausgedrückt werden

$$V(r) = -\frac{C_3}{r^3 v_{\text{shape}}(r/L)}, \quad (2.51)$$

wobei für  $v_{\text{shape}}(x)$  das Verhalten

$$v_{\text{shape}}(x) \sim \begin{cases} 1 & \text{für } x \rightarrow 0, \\ x & \text{für } x \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (2.52)$$





**Abbildung 2.9:** Einfluss des Parameters  $\rho$  auf die Reflexionswahrscheinlichkeit  $P_R$  am Beispiel der Streuung von metastabilen  $\text{Ne}^*$ -Atomen an einer Siliziumoberfläche. Das linke Bild zeigt  $P_R$  für die Potentiale  $v_1$  (2.53) und  $v_2$  (2.54) im Vergleich mit den homogenen Potentialen  $-C_\alpha/r^\alpha$ ,  $\alpha = 3, 4$  und dem realistischen Wert von  $\rho = 8.9$ . Auf der rechten Seite wurde  $\rho$  durch  $\rho^{-1} \approx 0.11$  ersetzt. Im Inneren des Graphen befindet sich ein vergrößerter Ausschnitt für die Wellenzahlen  $k = 4.5 \mu\text{m}^{-1}$  bis  $k = 4.9 \mu\text{m}^{-1}$ . Für  $\rho > 1$  dominiert das  $-1/r^4$ -Potential (linkes Bild), für  $\rho < 1$  das  $-1/r^3$ -Potential (rechtes Bild).

gefordert werden muss, um die Asymptotik von (2.46) richtig wiederzugeben. Shimizu verwendet in seinen Berechnungen

$$v_{\text{shape}}(x) \stackrel{\text{Def.}}{=} v_1(x) = 1 + x, \quad (2.53)$$

wogegen Holstein als Shape-Funktion

$$v_{\text{shape}}(x) \stackrel{\text{Def.}}{=} v_2(x) = \frac{\pi/2}{\arctan(\pi/2x)} \quad (2.54)$$

vorschlägt [61]. Im Vergleich zum tatsächlichen Potential beschreibt  $v_2(x)$  einen sanfteren Übergang zwischen dem nicht-retardierte und dem retardierte Potential, im Gegensatz zu  $v_1(x)$ , welches zu abrupt ist. Das realistische Potential wird zwischen diesen beiden Funktionen zu erwarten sein.<sup>8</sup>

Ob sich die Reflexionswahrscheinlichkeit letztendlich wie für ein van der Waals- oder wie für ein Casimir-Polder-Potential verhält, hängt von einem weiteren Parameter  $\rho$  ab:

$$\rho = \frac{\sqrt{2\mathcal{M}C_3}}{\hbar\sqrt{C_4}} = \frac{\beta_3}{\beta_4}. \quad (2.55)$$

Für  $\rho < 1$  dominiert der van der Waals-Anteil  $-1/r^3$ , während für  $\rho > 1$  der Anteil proportional zu  $-1/r^4$  die Reflektivität dominiert.

Im obigen Experiment sind die Stärkeparameter  $C_3 = 1.4705$  a.u. und  $C_4 = 1989$  a.u., [64], entsprechen also den Längenparametern  $\beta_3 \approx 108200$  a.u. bzw.  $\beta_4 \approx 12100$  a.u. (vgl. (2.30)) und einem Wert von etwa 8.94 für  $\rho$ .  $\rho$  ist somit größer als 1.

Abbildung 2.9 zeigt den Einfluss des Parameters  $\rho$  auf die Reflexionswahrscheinlichkeit  $P_R$  für verschiedene Potentiale in einer logarithmischen Skala als Funktion der Wellenzahl  $k$  im Bereich von 0 bis  $5 \mu\text{m}^{-1}$ . Zum Vergleich der Ergebnisse für die realistischen Potentiale  $v_1$  (durchgezogene Linien) und  $v_2$  (gestrichelte Linien) ist ebenfalls  $P_R$  für das homogene

<sup>8</sup>Mit Hilfe der Lifshitz-Theorie kann das exakte Potential berechnet werden [62, 63], ein analytischer Ausdruck ist nicht bekannt [16].

$\varepsilon$	H	He( $2^3S$ )		Ne( $1s_3$ )		Na	Rb	Cs
	$\infty$	$\infty$	11.7	$\infty$	11.7	$\infty$	$\infty$	$\infty$
$C_3$	0.25	1.9009	1.3621	1.7491	1.4705	1.889	2.291	2.589
$C_4$	73.61	5163	3510	2925	1989	1417	5221	6579
$\beta_3$	919	27740	19877	127485	108188	$1.583 \times 10^5$	$7.139 \times 10^5$	$1.255 \times 10^6$
$\beta_4$	520	8680	7157	14601	12097	$1.090 \times 10^4$	$4.033 \times 10^4$	$5.646 \times 10^4$
$\rho$	1.77	3.20	2.78	8.73	8.94	14.52	17.70	22.23
$L$	294	2716	2577	1672	1353	750	2278	2540

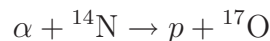
**Tabelle 2.1:** Die Stärkeparameter  $C_3$ ,  $C_4$  und die daraus resultierenden charakteristischen Längen  $\beta_3$ ,  $\beta_4$ ,  $L$  in a.u. und  $\rho$  aus Gleichung (2.55) für verschiedene Elemente. Für Wasserstoff, Rubidium und Caesium sind diese [65] entnommen, für metastabiles Helium und einer perfekt leitenden Wand wurden die Stärkeparameter in [44] und für Natrium in [66] bestimmt. Für metastabiles Helium und Neon im Fall  $\varepsilon = 11.7$  sind die Werte aus [64].

Potential  $-C_3/r^3$  (blaue, gestrichpunktete Linien) und  $-C_4/r^4$  (rote, gepunktete Linien) dargestellt. Auf der linken Seite sind die Parameter  $\beta_3$  und  $\beta_4$  entsprechend den realen Werten im Experiment gewählt, wohingegen auf der rechten Seite  $\beta_3$  und  $\beta_4$  vertauscht wurden, welches einem neuen  $\tilde{\rho} = \rho^{-1} = 0.11$  entspricht. Das Innere der Graphen zeigt einen vergrößerten Ausschnitt der Ergebnisse für die Wellenzahlen  $k = 4.5 \mu\text{m}^{-1}$  bis  $k = 4.9 \mu\text{m}^{-1}$ , um die geringe Abweichung der realistischeren Potentiale  $v_1$  und  $v_2$  von den homogenen Potentialen zu verdeutlichen. Während die Reflektivitäten für die realistischen Potentiale  $v_1$  und  $v_2$  auf der linken (rechten) Seite fast deckungsgleich mit dem Ergebnis eines Casimir-Polder-Potentials proportional zu  $-1/r^4$  (van der Waals-Potential proportional zu  $-1/r^3$ ) sind, weichen sie für ein Potential proportional zu  $-1/r^3$  (bzw.  $-1/r^4$ ) deutlich ab, was obige Aussage über den Einfluss von  $\rho$  bestätigt. Für die Reflexion von Atomen an einer leitenden Wand ist die Dominanz des  $-1/r^4$ -Anteils des Potentials eine generelle Eigenschaft, da für alle Elemente  $\rho$  größer als eins ist und immer der Casimir-Polder-Anteil des Potentials überwiegt. Um dies zu verdeutlichen, sind die Werte  $\beta_\alpha$ ,  $C_\alpha$ ,  $\alpha = 3, 4$ , sowie  $L$  (jeweils in a.u.) und  $\rho$  in Tabelle 2.1 für verschiedene Elemente aufgelistet.  $\varepsilon$  ist die jeweilige Dielektrizitätskonstante ( $\varepsilon = \infty$  bedeutet hier eine perfekt leitende Wand,  $\varepsilon = 11.7$  entspricht dem Wert für das Si-Kristall in [64]).  $C_3$  und  $C_4$  wurden für Wasserstoff, sowie Rubidium und Caesium von Marinescu *et al.* bestimmt [65], für metastabiles Helium und  $\varepsilon = \infty$  sind die Werte in [44] zu finden. Für Natrium-Atome vor einer flachen Wand haben Kharchenko *et al.* [66] die Parameter  $C_3 = 1.889$  a.u. und  $C_4 = 1417$  a.u. mit Hilfe von elektrischen Dipol-Oszillatorstärkenbeiträgen bestimmt, indem sie experimentelle und theoretische Energien, Oszillatorstärken und Photoionisationsdaten verwendeten, um die exakten Werte für die Oszillatorstärkesummen zu erhalten. Ihre Ergebnisse für  $C_3$  stimmen mit den aktuellsten theoretischen Ergebnissen von Derevianko *et al.* [67] und Johnson *et al.* [68], basierend auf einer relativistischen Viel-Körper-Störungstheorie überein.  $C_3$  und  $C_4$  für metastabiles Helium und Neon im Fall  $\varepsilon = 11.7$  entsprechen den Angaben in [64]. Weiter bestätigt diese Tabelle obige Aussage, dass die charakteristischen Längen  $\beta_\alpha$  von der Größenordnung von mehreren tausend bis hunderttausend atomaren Einheiten sind. Sie erlaubt uns, die Streuung von ultrakalten Atomen mit den einfacheren homogenen Potentialen zu betrachten, da die Quantenreflexion den dominanten Anteil der Streuung beschreibt und die komplizierten Wechselwirkungen der Atome direkt an der Oberfläche vernachlässigt werden können.

# Kapitel 3

## Streutheorie in drei Dimensionen

Seit den Anfängen der Quantenmechanik bilden Streuexperimente die Grundlage vieler Untersuchungen über die Wechselwirkung von Atomen mit Oberflächen bzw. von Atomen untereinander und geben Aufschluss auf Eigenschaften von Atomen. So entdeckte Rutherford 1911 [69] den Atomkern durch Streuung von  $\alpha$ -Teilchen an einer Gold-Folie. Das Frank-Hertz Experiment, bei dem Elektronen an Quecksilber-Dampf gestreut werden, zeigte die Existenz von atomaren Energieniveaus. Aber nicht nur in der Atomphysik sondern auch in der Kern- und Teilchenphysik sind Streuexperimente von großer Bedeutung. Rutherford fand die ersten Hinweise auf die Kernstruktur, indem er den Streuprozess



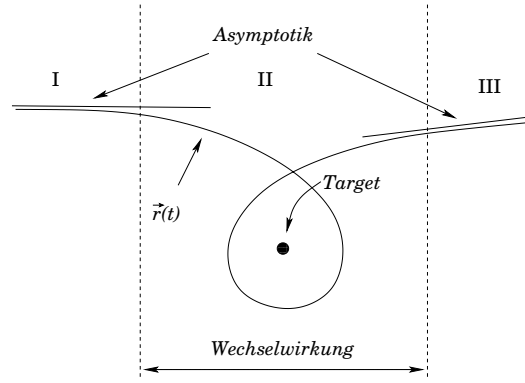
untersuchte. Auch die Elementarteilchenphysik kommt ohne Streuexperimente nicht aus – wie gerade das Großprojekt LHC am Cern zeigt, an dem die Struktur der kleinsten Teilchen untersucht werden soll. Ziel der Streutheorie ist es, diese Experimente theoretisch zu beschreiben und damit die Eigenschaften der Materie zu verstehen.

Das Ziel dieses Abschnitts ist es, das Streuverhalten ultrakalter Atome an absorbierenden Nanokugeln zu untersuchen. Hierfür gehen wir zunächst auf die Grundlagen der Streutheorie in drei Dimensionen ein und befassen uns dann mit dem führenden Schwellenverhalten von Streuphasen in attraktiven, singulären Potentialen. Im nächsten Abschnitt bestimmen wir die nächsthöhere Ordnung der  $s$ -Wellen Streuphase mit Hilfe der *effective-range Theorie*. Wir erweitern das Verfahren von der Streuung an repulsiven Potentialen auf den Fall der Quantenreflexion und berechnen diese Größe analytisch für attraktive, homogene, singuläre Potentiale. Für die führenden Terme der Streuphase in höheren Partialwellen nutzen wir die Theorie der *Jost-Funktionen* und zeigen in diesem Zusammenhang die Analogien zwischen der Streuung an repulsiven und Quantenreflexion an attraktiven Potentialen. Abschließend untersuchen wir den Einfluss von Retardierungseffekten auf das Streuverhalten von polarisierbaren Atomen an Nanokugeln an den Beispielen metastabiles Helium und Natrium im Grundzustand, die an einer perfekt leitenden Kugel mit einem Radius von 200 bzw. 2000 a.u. gestreut werden.

### 3.1 Grundlagen

#### 3.1.1 Allgemeine Aussagen zur Streutheorie

Betrachten wir zunächst ein typisches Streuexperiment: ein Teilchen der Masse  $\mathcal{M}$  wird von einem Beschleuniger auf die Energie  $E$  beschleunigt, trifft auf ein Target und wird an diesem gestreut.



**Abbildung 3.1:** Schematische Darstellung eines Streuexperiments.

Ziel der klassischen Streutheorie ist die Bestimmung der Trajektorie  $\vec{r}(t)$  des Projektils, die sich durch den Einfluss des Targets auf das Projektil ergibt. Hierfür können wir drei – wenn auch nicht klar definierte – Bereiche unterscheiden (s. Abbildung 3.1): im ersten Bereich (sehr weit weg vom Target) kann der Einfluss des Targets vernachlässigt werden und das Projektil bewegt sich auf einer geraden Bahn, bis die Wechselwirkung zwischen Projektil und Target die Richtung des einlaufenden Teilchens ändert. Im “Wechselwirkungsbereich” II kann es zu sehr komplizierten Reaktionen zwischen dem Teilchen und dem Target kommen, bis dann im Bereich III das Teilchen den Einflussbereich des Targets verlässt und sich wieder auf einer geraden Bahn fortbewegt [70]. Das Verhalten von  $\vec{r}(t)$  hängt sehr stark vom Wechselwirkungspotential zwischen Teilchen und Target ab. Liegt ein sehr stark attraktives Potential vor, wird das Projektil “gefangen”, so dass sich entweder eine geschlossene Bahn oder eine spiralförmige Bahn ausbildet und das Projektil den Einflussbereich des Targets nicht mehr verlässt, während sich bei einem schwachen Potential nur die Richtung des einlaufenden Teilchens ändert. Ein Ziel der Streutheorie besteht darin, z.B. den *Wirkungsquerschnitt*  $\sigma$

$$\sigma = \frac{\text{Anzahl der gestreuten Teilchen pro Zeiteinheit}}{\text{Stromdichte}} \quad (3.1)$$

bzw. den *differentiellen Wirkungsquerschnitt*  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$

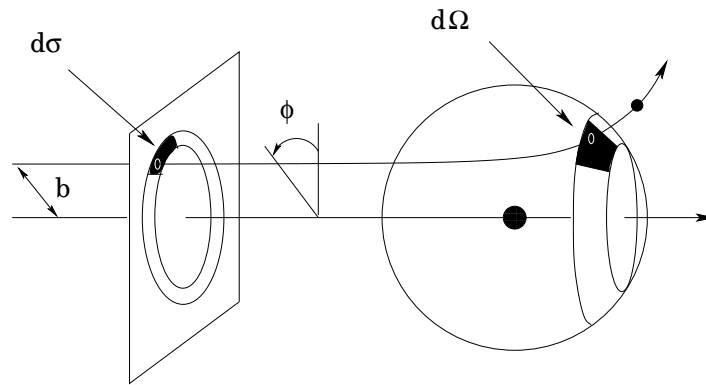
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \frac{b}{\sin \theta} \left( \frac{db}{d\theta} \right) \right|, \quad (3.2)$$

zu bestimmen, die beide vom Stoßparameter  $b$  und den Streuwinkeln  $\theta$  und  $\phi$  abhängig sind (s. Abbildung 3.2).

Während in der klassischen Streutheorie  $\vec{r}(t)$  durch Newton’s Gleichung  $\mathcal{M}\ddot{\vec{r}} = -\vec{\nabla}_{\vec{r}}V(\vec{r})$  beschrieben wird, muss in der quantenmechanischen Streutheorie im Allgemeinen die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (2.2) gelöst werden. Unter der Annahme, dass der einlaufende Teilchenstrahl sehr lange auf das Target einwirkt bzw. das einlaufende und reflektierte Wellenpaket “fast” monochromatisch sind, können wir das System als stationär betrachten und stattdessen das Streuproblem mit Hilfe der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung (2.3) behandeln [38].

In dieser Arbeit behandeln wir die Streuung von einem einzelnen, spinlosen Teilchen der Masse  $\mathcal{M}$  an einem stationären Potential  $V(\vec{r})$ , für das sich nach Abseparierung der Schwerpunkts- und der Relativkoordinate die zu lösende Gleichung auf

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = 0 \quad (3.3)$$



**Abbildung 3.2:** Teilchen, die durch die Fläche  $d\sigma$  einlaufen, werden in den Raumwinkel  $d\Omega$  gestreut.

reduziert ( $\mu$  ist die reduzierte Masse, die für den Grenzwert eines “unendlich schweren” Targets in  $\mathcal{M}$  übergeht). Ähnlich zur klassischen Streutheorie suchen wir nach dem asymptotischen Verhalten der Lösungen von Gleichung (3.3), die für große Abstände  $r \rightarrow \infty$  als eine Überlagerung von einer – ohne Beschränkung der Allgemeinheit – parallel zur  $z$ -Achse einlaufenden ebenen Welle und einer auslaufenden Kugelwelle besteht:

$$\psi(\vec{r}) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \exp(ikz) + f(\theta, \phi) \frac{\exp(ikr)}{r} = \psi_{\text{ein}} + \psi_{\text{aus}} . \quad (3.4)$$

$f(\theta, \phi)$  ist die *Streuamplitude*, welche die Wahrscheinlichkeit der Streuung im Winkel  $\theta$  und  $\phi$  bestimmt. Analog zum klassischen differentiellen Wirkungsquerschnitt (3.2) definieren wir den quantenmechanischen, differentiellen Wirkungsquerschnitt mit Hilfe der Streuamplitude

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2 \quad (3.5)$$

und den Wirkungsquerschnitt durch

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega . \quad (3.6)$$

### 3.1.2 Die Partialwellenmethode, Streuphasen und $S$ -Matrix

Ist das Wechselwirkungspotential  $V(\vec{r})$  radial-symmetrisch, hängt es also nur vom Abstand  $|\vec{r}| = r$  zwischen dem Teilchen und dem Target ab, kann das Streuproblem mit Hilfe der *Partialwellenmethode* vom ursprünglich drei-dimensionalen Problem formal auf ein eindimensionales Problem und somit auf die eindimensionale Schrödinger-Gleichung umgeschrieben werden.<sup>1</sup> Hierfür drücken wir die Lösungen  $\psi(\vec{r})$  mit Hilfe von Legendre-Polynomen aus,

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{u_l(r)}{r} Y_{l,0}(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{u_l(r)}{r} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos(\theta)) , \quad (3.7)$$

wobei  $u_l$  (unter der Annahme, dass die Masse  $\mathcal{M}$  des Teilchens klein gegenüber der des Targets ist) die radiale Schrödinger-Gleichung

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}} \frac{l(l+1)}{r^2} - E \right] u_l(r) = 0 \quad (3.8)$$

<sup>1</sup>Zu beachten ist, dass die Ortskoordinate im Gegensatz zum eindimensionalen Fall auf den rechten Halbraum  $r \geq 0$  beschränkt ist.

erfüllt, die wir mit dem reduzierten Potential  $U(r) = \frac{2\mathcal{M}}{\hbar^2}V(r)$  und der Energie  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mathcal{M}}$  des einlaufenden Teilchens als

$$\left[ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + U(r) - k^2 \right] u_l(r) = 0 \quad (3.9)$$

schreiben können.

Analytische Lösungen der freien radialen Schrödinger-Gleichung,  $U(r) = 0$ , sind die reguläre Lösung  $s_l(kr)$  und die irreguläre Lösung  $c_l(kr)$ , die sich mit den sphärischen Besselfunktionen  $j_l(kr)$  und  $n_l(kr)$  schreiben lassen als:

$$s_l(kr) = kr j_l(kr) \stackrel{kr \rightarrow \infty}{\sim} \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right), \quad (3.10a)$$

$$c_l(kr) = kr n_l(kr) \stackrel{kr \rightarrow \infty}{\sim} \cos\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right). \quad (3.10b)$$

Für Potentiale  $U(r)$ , die für  $r \rightarrow \infty$  schneller abfallen als  $1/r^2$ , ist das asymptotische Verhalten der Lösung  $u_l(r)$  eine Überlagerung von  $s_l(kr)$  und  $c_l(kr)$

$$u_l(r) \propto s_l(kr) + \tan \delta_l(k) c_l(kr) \stackrel{kr \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l(k)\right)}{\cos \delta_l(k)} \propto e^{2i\delta_l(k)} e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr} \quad (3.11)$$

mit der für teilchenzahlerhaltenden Reaktionen reellen *Streuphase*  $\delta_l(k)$  und der *Streumatrix*  $S_l(k)$

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}. \quad (3.12)$$

Die Streuphase  $\delta_l(k)$  beschreibt die Phasenverschiebung der Lösung mit Potential im Vergleich zur freien Lösung ( $U(r) \equiv 0$ ) und enthält alle Informationen des Streuprozesses.

Um eine Verbindung zum asymptotischen Verhalten von  $\psi(\vec{r})$  aus Gleichung (3.4) herzustellen, entwickeln wir sowohl  $\psi_{\text{ein}}$  als auch  $\psi_{\text{aus}}$  nach Legendre-Polynomen und führen hierbei die *Partialwellenamplitude*  $f_l$  ein:

$$\psi_{\text{ein}} = e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{s_l(kr)}{kr} P_l(\cos \theta) \stackrel{kr \rightarrow \infty}{\sim} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta) \frac{2l+1}{2ikr} (e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}) \quad (3.13)$$

und

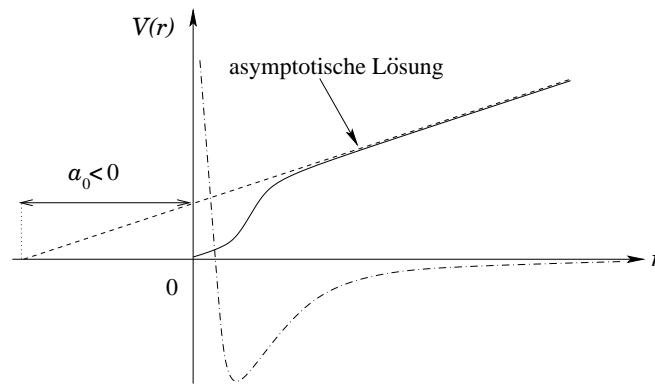
$$\psi_{\text{aus}} = f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} = \sum_{l=0}^{\infty} f_l P_l(\cos \theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (3.14)$$

Ein Koeffizientenvergleich mit (3.4) ergibt die asymptotische Form der Radialwellenfunktion in der Partialwelle  $l$ :

$$u_l(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\sqrt{4\pi(2l+1)}}{2ik} \left[ \left( 1 + \frac{2ik f_l}{2l+1} \right) e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr} \right], \quad (3.15)$$

wobei wir mit (3.11)  $f_l$  berechnen können:

$$f_l = \frac{2l+1}{2ik} (S_l(k) - 1). \quad (3.16)$$



**Abbildung 3.3:** Geometrische Interpretation der Streulänge  $a_0$ . In diesem Fall ist das Potential zu schwach, um einen gebundenen Zustand auszubilden, und die Streuphase  $a_0$  ist negativ.

Für den differentiellen und integrierten Wirkungsquerschnitt aus den Gleichungen (3.5) und (3.6) folgt:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f(\theta)|^2 = \\ &= \sum_{l,l'=0}^{\infty} \frac{(2l+1)(2l'+1)}{k^2} e^{i(\delta_{l'}(k) - \delta_l(k))} \sin \delta_l(k) \sin \delta_{l'}(k) P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta), \end{aligned} \quad (3.17a)$$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k). \quad (3.17b)$$

Für teilchenzahlerhaltende Prozesse kann  $\sigma$  direkt aus dem Imaginärteil der Streuamplitude in Vorwärtsrichtung ( $\theta = 0$ ) mit dem *optischen Theorem* bestimmt werden:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \Im(f(\theta = 0)). \quad (3.18)$$

Eine weitere Größe, die mit der Streuphase  $\delta_l(k)$  in Verbindung gebracht werden kann, ist die Streulänge  $a_l$ , die durch den Grenzwert

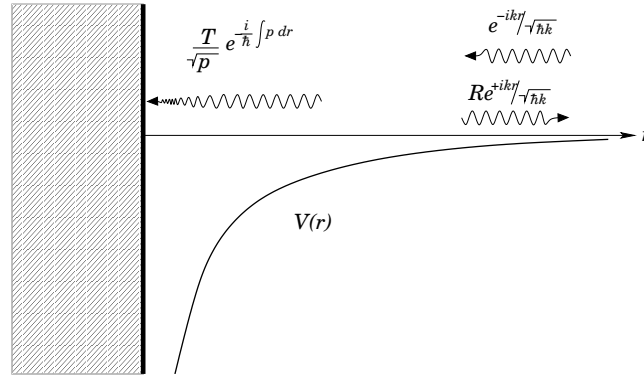
$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_l(k)}{k^{2l+1}} = -a_l^{2l+1} \quad (3.19)$$

definiert wird.<sup>2</sup> Für die  $s$ -Wellenstreuung können aus dem Vorzeichen der Streulänge Aussagen über das Potential getroffen werden: eine stark negative Streulänge  $a_0 < 0$  bedeutet ein attraktives Potential, das gerade zu schwach ist, um einen (weiteren) gebundenen Zustand auszubilden. Die Streulänge divergiert ( $|a_0| \rightarrow \infty$ ), sobald ein gebundener Zustand mit der Dissoziationsgrenze zusammen fällt. Nimmt die Tiefe des Potentials zu, ist eine große positive Streulänge  $a_0$  ein Zeichen dafür, dass ein (weiterer) noch schwach gebundener Zustand ausgebildet werden konnte [71].

Geometrisch ist der Wert der Streulänge der Schnittpunkt der asymptotischen Lösung bei  $E = 0$  mit der  $r$ -Achse (vgl. Abbildung 3.3).

Handelt es sich bei dem Streuprozess um eine Reaktion mit Teilchenverlust, kann obiger Formalismus beibehalten werden, wobei jedoch die reelle Streuphase  $\delta_l(k)$  durch eine komplexe

<sup>2</sup>Im Gegensatz zu anderen Definitionen von  $a_l$  (z.B. [70]) gewährleistet diese Definition, dass es sich bei der Streulänge tatsächlich um eine Größe mit der Dimension einer Länge handelt.



**Abbildung 3.4:** Schematische Darstellung der Randbedingungen (3.21) zur Beschreibung von Quantenreflexion. Für  $r \rightarrow \infty$  besteht die Wellenfunktion aus einem einlaufenden und reflektierten Anteil, für  $r \rightarrow 0$  wird die Lösung der Schrödinger-Gleichung durch einlaufende WKB-Wellen beschrieben.

Streuphase  $\delta_l(k)$  und die Streulänge  $a_l$  durch eine komplexe Streulänge  $\mathcal{A}_l$  ersetzt werden muss. Die Streumatrix  $S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}$  ist jetzt nicht mehr unitär, es gilt:  $|S_l(k)| \leq 1$ . Das optische Theorem (3.18) enthält einen zusätzlichen Term  $\sigma_{\text{abs}}$ , der die Absorption berücksichtigt:

$$\Im(f(\theta = 0)) = \frac{k}{4\pi} (\sigma + \sigma_{\text{abs}}) . \quad (3.20)$$

## 3.2 Schwellennahe Quantenreflexion

Die bisherigen Aussagen über Quantenreflexion wenden wir jetzt auf den Fall der radialen Schrödinger-Gleichung mit einem rein attraktiven Potential  $V(r)$  an, d.h. wir betrachten die  $s$ -Wellenstreuung in drei Dimensionen und setzen  $l = 0$ .<sup>3</sup> Unter der Annahme, dass die WKB-Wellenfunktion eine gute Approximation der Schrödinger-Gleichung sowohl im Limes  $r \rightarrow \infty$ , als auch für  $r \rightarrow 0$  ist – hierfür muss das Potential für  $r \rightarrow 0$  schneller abfallen als  $-1/r^2$  – wählen wir zur Beschreibung von Quantenreflexion die Randbedingungen (2.34a) und (2.34b) ( $r_0$  ist ein Referenzpunkt)

$$\psi(r) \propto \begin{cases} \frac{T}{\sqrt{p(r)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{r_0}^r p(r') dr'\right) & \text{für } r \rightarrow 0, \\ \frac{1}{\sqrt{\hbar k}} (e^{-ikr} + R_{l=0}(k) e^{ikr}) & \text{für } r \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (3.21)$$

wie es in Abbildung 3.4 schematisch für ein attraktives singuläres Potential dargestellt ist. Im Zwischenbereich soll ein Gebiet hoher Quantalität vorliegen, an dem Quantenreflexion stattfindet. Auf Grund der einlaufenden Randbedingungen für  $r \rightarrow 0$  liegt keine Teilchenzahlerhaltung vor; die Reflexionswahrscheinlichkeit  $P_R$  ist kleiner als 1. Die Reflexionsamplitude  $R_{l=0}(k)$  steht mit der  $S$ -Matrix (3.12) und der Streuphase  $\delta_{l=0}(k)$  über den Zusammenhang

$$S_{l=0}(k) = e^{2i\delta_{l=0}(k)} = -R_{l=0}(k) \quad (3.22)$$

in Verbindung.

Wie oben bereits erwähnt, liegt die Besonderheit der Quantenreflexion darin, dass die Reflexionswahrscheinlichkeit im Limes  $k \rightarrow 0$  gegen 1 strebt und somit das Streuverhalten

<sup>3</sup>Für  $l > 0$  enthält das Potential durch den Zentrifugalterm einen repulsiven Anteil. Es handelt sich in Schwellennähe nicht mehr um Quantenreflexion, sondern um klassisch erlaubte Reflexion.



ultrakalter Atome dominiert. Dieses Schwellenverhalten der Reflexion  $R$  hängt für Potentiale, die schneller abfallen als  $1/r^2$ , nur von den Eigenschaften des Potentialschwanzes ab und kann mit Hilfe von drei unabhängigen ‘‘Schwanzparametern’’ beschrieben werden: der *Schwellenlänge*  $b$ , der *Reflexionsphase*  $\phi_0$  bei der Energie  $E = 0$  und der *mittleren Streulänge*  $\bar{a}$ . Für einen endlichen Wert von  $b$  muss das Potential schneller abfallen als  $1/r^2$ , wohingegen für eine endliche mittlere Streulänge  $\bar{a}$  das Potential schneller abfallen muss als  $1/r^3$  [22, 72]. Obwohl die Schwellenparameter durch Lösungen der Schrödinger-Gleichung bei  $E = 0$  bestimmt werden können, beschreiben sie das führende Verhalten der Reflexion für  $k \rightarrow 0$  richtig, da die Schrödinger-Gleichung die Energie in der Ordnung  $\mathcal{O}(E)$  enthält und als eine Störung höherer Ordnung in der Wellenzahl  $k$  aufgefasst werden kann.

Zur Bestimmung der Schwanzparameter betrachten wir die Schrödinger-Gleichung für  $E = 0$ , deren zwei linear unabhängige Lösungen  $\psi_0$  und  $\psi_1$  folgendes asymptotisches Verhalten für  $r \rightarrow \infty$  aufweisen:

$$\psi_0(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} 1 + o(r^{-1}) \quad \text{bzw.} \quad \psi_1(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} r + o(r^0). \quad (3.23)$$

In einem WKB-Gebiet können die exakten Schwellenlösungen  $\psi_0$  und  $\psi_1$  durch WKB-Wellen

$$\psi_{0,1}(r) = D_{0,1} \frac{1}{\sqrt{p_0(r)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_r^\infty p_0(r') dr' - \frac{\phi_{0,1}}{2}\right) \quad (3.24)$$

beschrieben werden, wobei  $D_{0,1}$  (bzw.  $\phi_{0,1}$ ) wohldefinierte Amplituden (bzw. Phasen) sind und  $p_0(r)$  den lokalen klassischen Impuls für  $E = 0$  bezeichnet. Die Lösung  $\psi_0$  bleibt für  $r \rightarrow \infty$  beschränkt. Somit ist der erste Schwellenparameter, die Phase  $\phi_0$ , der Schwellenwert der Reflexionsphase am äußeren Umkehrpunkt, der für  $E = 0$  bei unendlich liegt.

Ausgehend von (3.24) lässt sich eine Wellenfunktion konstruieren, die proportional zu der einlaufenden Welle in (3.21) ist:

$$\psi(r) = \frac{D_0 \psi_1(r) \exp(i\phi_0/2) - D_1 \psi_0(r) \exp(i\phi_1/2)}{D_0 D_1 \sin[(\phi_0 - \phi_1)/2]}. \quad (3.25)$$

Passen wir das asymptotische Verhalten dieser Wellenfunktion an das Schwellenverhalten der einlaufenden und reflektierten Welle an,

$$\frac{1}{\sqrt{\hbar k}} (e^{-ikr} + R_{l=0}(k) e^{ikr}) \stackrel{kr \rightarrow 0}{\sim} 1 + R_{l=0}(k) - ikr(1 - R_{l=0}(k)), \quad (3.26)$$

erhalten wir für  $k \rightarrow 0$  den führenden Beitrag der Reflexionsamplitude

$$R_{l=0}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -\frac{1 - ik \exp(-i(\phi_0 - \phi_1)/2) D_1/D_0}{1 + ik \exp(-i(\phi_0 - \phi_1)/2) D_1/D_0} \quad (3.27)$$

und somit den führenden Beitrag zu  $|R_{l=0}(k)|$ , der die Schwellenlänge  $b$  definiert:

$$|R_{l=0}(k)| \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} 1 - 2kb = \exp(-2kb) + \mathcal{O}(k^2), \quad (3.28)$$

$$b = \frac{D_1}{D_0} \sin\left(\frac{\phi_0 - \phi_1}{2}\right). \quad (3.29)$$

Der dritte Parameter, die mittlere Streulänge  $\bar{a}$ , beschreibt das Verhalten der Phase von  $R_{l=0}(k)$  und lässt sich aus den Gleichungen (3.28) und (3.29) berechnen:

$$\arg R_{l=0}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \pi - 2k\bar{a}, \quad (3.30)$$

$$\bar{a} = \frac{b}{\tan[(\phi_0 - \phi_1)/2]}. \quad (3.31)$$

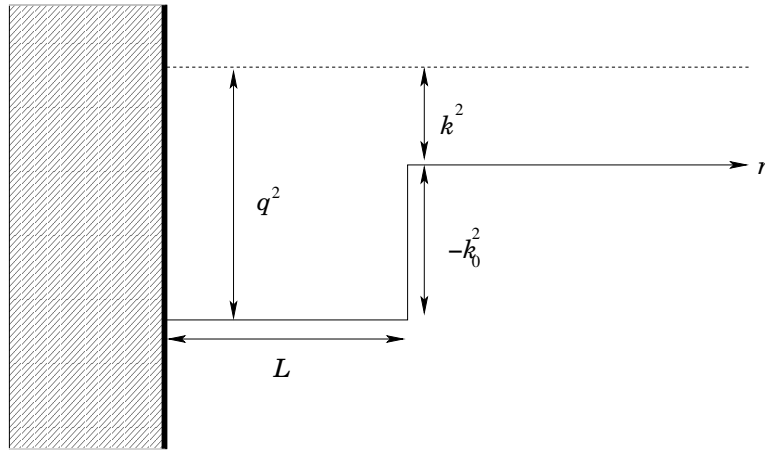


Abbildung 3.5: Schematische Darstellung des Stufenpotentials.

Die Schwellenlänge und mittlere Streulänge können zu einer – auf Grund des Teilchenverlusts – komplexen Streulänge  $\mathcal{A}$  zusammengefasst werden:

$$\mathcal{A} = \bar{a} - ib . \quad (3.32)$$

Die Ableitungen von  $\arg R_{l=0}(k)$  nach der Energie  $E$  bzw. der Wellenzahl  $k$  kann mit einer Zeitverschiebung  $\Delta t$  bzw. einer Ortsverschiebung  $\Delta r$  in Verbindung gebracht werden, die ein fast monochromatisches Wellenpaket durch Quantenreflexion erfährt [73, 74]:

$$\Delta r = -\frac{1}{2} \frac{d}{dk} (\arg R_{l=0}(k)) \quad \text{bzw.} \quad \Delta t = -\hbar \frac{d}{dE} (\arg R_{l=0}(k)) . \quad (3.33)$$

Somit entspricht die Zeitentwicklung eines reflektierten Wellenpaketes der Entwicklung eines freien Wellenpaketes, das nicht bei  $r = 0$ , sondern bei  $r = \Delta r$  reflektiert wird. Für  $\Delta r > 0$  liegt der “virtuelle” Umkehrpunkt vor dem Ursprung und bedeutet einen Zeitgewinn gegenüber dem freien Teilchen.

### 3.2.1 Beispiel: Stufenpotential

Ein sehr einfaches, analytisch lösbares Beispiel zur Bestimmung der Schwellenparameter ist das Stufenpotential (s. Abbildung 3.5),

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{\hbar^2 k_0^2}{2\mathcal{M}} & \text{für } r \leq L, \\ 0 & \text{für } r > L, \end{cases} \quad (3.34)$$

bei dem ein Teilchen der Energie  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mathcal{M}}$  von rechts einlaufen soll. Für dieses Potential ist die Quantalitätsfunktion für  $r \neq L$  identisch Null, im Punkt  $r = L$  dagegen unendlich, so dass Gleichung (2.27) nicht erfüllt ist und der quantenmechanische Bereich ausgezeichnet wird. Für  $r \neq L$  können wir WKB-Wellen als Lösungen der Schrödinger-Gleichung ansetzen und damit Quantenreflexion beschreiben.

Um den Reflexionskoeffizienten  $R_S(k)$  zu bestimmen, müssen die Randbedingungen der Wellenfunktion  $\psi(r)$  für  $r = 0$  festgelegt werden. Von  $\psi(r)$  wird in der “gewöhnlichen” Streutheorie gefordert, dass sie im Ursprung regulär ist, d.h. dass  $\psi(0) = 0$  gilt. Die reguläre Lösung für ein konstantes Potential ist eine Sinus-Funktion. Wir wählen folgenden Ansatz

für  $\psi(r)$ :

$$\psi(r) \propto \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\hbar q}} \sin(qr) & \text{für } r \leq L, \\ \frac{1}{\sqrt{\hbar k}} (e^{-ikr} + R_S(k)e^{ikr}) & \text{für } r > L, \end{cases} \quad (3.35)$$

mit  $q^2 = k_0^2 + k^2$ . Aus der Stetigkeit der Wellenfunktion und deren Ableitung an der Stelle  $r = L$  erhalten wir die bekannte Reflektivität

$$R_S(k) = -\frac{(q+k)e^{i(q-k)L} + (q-k)e^{-i(q+k)L}}{(q+k)e^{-i(q-k)L} + (q-k)e^{i(q+k)L}}, \quad (3.36)$$

für die  $|R_S(k)|^2 = 1$  ist – unabhängig von  $k$  –, da die gesamte Welle nicht nur bei  $r = L$ , sondern auch an der “unendlich hohen” Wand bei  $r = 0$  reflektiert wird.<sup>4</sup> Effekte wie z.B. Absorption wurden in diesem Beispiel nicht berücksichtigt.

Wählen wir stattdessen einlaufende WKB-Wellen für  $r < L$ ,

$$\psi(r) \propto \begin{cases} \frac{T}{\sqrt{\hbar q}} e^{-iqr} & \text{für } r \leq L, \\ \frac{1}{\sqrt{\hbar k}} (e^{-ikr} + R_S(k)e^{ikr}) & \text{für } r > L, \end{cases} \quad (3.37)$$

folgt aus den Stetigkeitsbedingungen an der Stelle  $r = L$  für  $R_S(k)$ :

$$R_S(k) = -\frac{q-k}{q+k} e^{-2ikL}, \quad (3.38)$$

und somit eine Reflexionswahrscheinlichkeit  $P_R$  kleiner als 1.

Abbildung 3.6 zeigt  $P_R$  (linkes Bild) und  $\arg R_S(k)$  (rechtes Bild) für das Stufenpotential mit einlaufenden WKB-Wellen als Funktion von  $k$ . Im Grenzfall  $k \rightarrow 0$  strebt  $|R_S(k)|^2$  gegen 1, wohingegen die Reflexionswahrscheinlichkeit für  $k \rightarrow q$  verschwindet. Dies entspricht dem Grenzwert einer verschwindenden Stufentiefe.

Die Schwanzparameter werden aus den Lösungen der Schrödinger-Gleichung bei  $E = 0$  bestimmt, die den Randbedingungen (3.23) genügen:

$$\psi_0(r) = \cos(k_0(L-r)), \quad (3.39)$$

$$\psi_1(r) = \frac{L}{\cos(\phi_1/2)} \cos\left(k_0(L-r) - \frac{\phi_1}{2}\right), \quad \text{mit} \quad \tan\left(\frac{\phi_1}{2}\right) = -\frac{1}{k_0 L}. \quad (3.40)$$

Die Reflexionsphase  $\phi_0$  am äußeren Umkehrpunkt, hier  $r = L$ , ist Null, die am inneren ( $\phi_1$ ) ist auf Grund der harten Wand  $\pi$ , so dass sich die restlichen Parameter aus den Gleichungen (3.29) und (3.31) bestimmen, z.B. [22]:

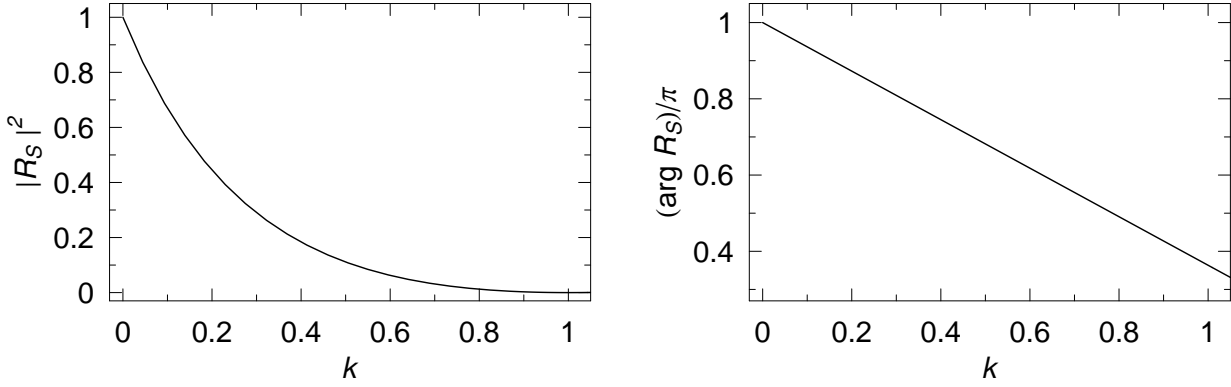
$$b = \frac{1}{k_0}, \quad \bar{a} = L, \quad \mathcal{A} = L - \frac{i}{k_0}. \quad (3.41)$$

### 3.2.2 Schwellenverhalten der Reflexion in homogenen, singulären Potentialen

Zur Bestimmung der Schwellenparameter für homogene Potentiale  $V_\alpha(r)$

$$V_\alpha(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}} \frac{\beta_\alpha^{\alpha-2}}{r^\alpha}, \quad (3.42)$$

<sup>4</sup>Aus der stationären Schrödinger-Gleichung lässt sich hier nicht zwischen klassischer Reflexion und Quantenreflexion unterscheiden. Hierfür muss die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung gelöst werden.



**Abbildung 3.6:** Reflexionswahrscheinlichkeit  $|R_S(k)|^2$  (linkes Bild) und  $\arg R_S(k)$  (rechtes Bild) für das Stufenpotential (3.34) mit einlaufenden WKB-Wellen als Funktion von  $k$  und den Parametern  $q = L = 1$ . Der exponentielle Abfall von  $|R_S(k)| \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \exp(-2kb)$  nach (3.28) ist deutlich erkennbar, ebenso wie der lineare Zusammenhang zwischen der Phase und der Wellenzahl (3.30):  $\arg R_{l=0}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \pi - 2k\bar{a}$ .

benötigen wir die Lösungen der Schrödinger-Gleichung für  $E = 0$ ,

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\beta_\alpha^{\alpha-2}}{r^\alpha} \right) \psi(r) = 0, \quad (3.43)$$

welche die Randbedingungen (3.23) erfüllen. Die Lösungen dieser Gleichung sind eine Linearkombination von Bessel-Funktionen [75],

$$\psi_0(r) = \frac{\Gamma(1+\nu)}{\nu^\nu} \sqrt{\frac{r}{\beta_\alpha}} J_\nu(z), \quad \psi_1(r) = \Gamma(1-\nu) \sqrt{\beta_\alpha r} J_{-\nu}(z), \quad (3.44)$$

$$\nu = \frac{1}{\alpha-2}, \quad z = 2\nu \left( \frac{\beta_\alpha}{r} \right)^{1/(2\nu)}, \quad (3.45)$$

so dass wir aus der WKB-Darstellung für  $r \rightarrow 0$  folgende Amplituden und Phasen aus Gleichung (3.24) erhalten:

$$D_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\pi\nu\beta_\alpha}} \frac{\Gamma(1+\nu)}{\nu^\nu}, \quad D_1 = \sqrt{\frac{\hbar\beta_\alpha}{\pi\nu}} \Gamma(1-\nu) \nu^\nu, \quad (3.46)$$

$$\phi_0^{(\alpha)} = \frac{\pi}{2} + \pi\nu, \quad \phi_1^{(\alpha)} = \frac{\pi}{2} - \pi\nu. \quad (3.47)$$

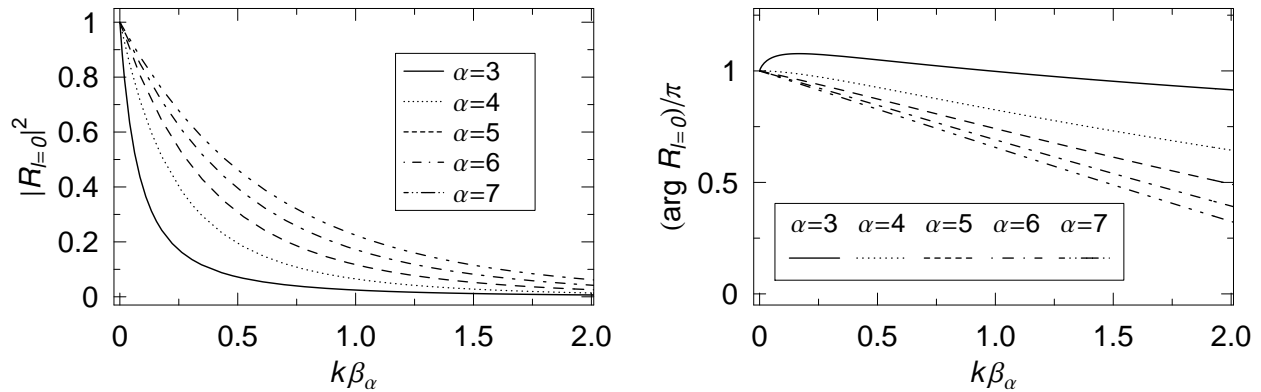
Mit den Gleichungen (3.29) und (3.31) berechnen sich die Schwanzparameter zu:

$$b_\alpha = \beta_\alpha \nu^{2\nu} \frac{\Gamma(1-\nu)}{\Gamma(1+\nu)} \sin(\pi\nu), \quad (3.48)$$

$$\bar{a}_\alpha = \beta_\alpha \nu^{2\nu} \frac{\Gamma(1-\nu)}{\Gamma(1+\nu)} \cos(\pi\nu) \quad (3.49)$$

und daraus die komplexe Streulänge  $\mathcal{A}_\alpha$ :

$$\mathcal{A}_\alpha = \beta_\alpha \nu^{2\nu} \frac{\Gamma(1-\nu)}{\Gamma(1+\nu)} e^{-i\pi\nu}. \quad (3.50)$$



**Abbildung 3.7:** Reflexivität  $|R_{l=0}(k)|^2$  (linkes Bild) und Phase  $\arg R_{l=0}(k)$  (rechtes Bild) für die homogenen Potentiale (3.42) als Funktion von  $k\beta_\alpha$  für  $\alpha = 3$  bis  $\alpha = 7$ . Die Reflexionswahrscheinlichkeit zeigt den für Quantenreflexion vertrauten, exponentiellen Abfall (3.28). Ebenso fällt für  $\alpha = 4$  bis  $\alpha = 7$  die Phase in führender Ordnung linear ab (vgl. (3.30)). Abweichend hiervon ist das Verhalten von  $\alpha = 3$ , für das keine endliche mittlere Streulänge definiert werden kann.

Für  $\alpha = 3$  ist  $\nu = 1$  und Gleichung (3.49) nimmt keinen endlichen Wert an; eine Definition einer mittleren Streulänge  $\bar{a}_\alpha$  sowie einer komplexen Streulänge  $\mathcal{A}_\alpha$  ist nicht möglich. Abbildung 3.7 zeigt die numerisch berechneten Reflexionsamplituden und Reflexionsphasen als Funktion von  $k\beta_\alpha$  für  $\alpha = 3$  bis  $\alpha = 7$ . Für  $\alpha = 3$  ist deutlich das nichtlineare Verhalten der Streuphase erkennbar. Die Ableitung  $\frac{d}{dk}(\arg R_{l=0}(k))$  aus (3.33) ist für  $\alpha \geq 4$  immer kleiner Null, so dass ein Zeitgewinn gegenüber der Bewegung des freien Teilchens vorliegt.

In Tabelle 3.1 sind die Werte für die Schwanzparameter  $b_\alpha$ ,  $\bar{a}$  und  $\phi_0$  angegeben, die das Schwellenverhalten  $k \rightarrow 0$  der Reflexion beschreiben.

$\alpha$	3	4	5	6	7	$\alpha \rightarrow \infty$
$\bar{a}_\alpha/\beta_\alpha$	—	0	0.3645056	0.4779888	0.5388722	1
$b_\alpha/\beta_\alpha$	$\pi$	1	0.6313422	0.4779888	0.3915136	$\pi/(\alpha - 2)$
$\phi_0^{(\alpha)}$	$\frac{3}{2}\pi$	$\pi$	$\frac{5}{6}\pi$	$\frac{3}{4}\pi$	$\frac{7}{10}\pi$	$\frac{1}{2}\pi$

**Tabelle 3.1:** Mittlere Streulänge  $\bar{a}_\alpha$  (3.49), Schwellenlänge  $b_\alpha$  (3.48) und die Phase  $\phi_0$  (3.47) für Quantenreflexion an den homogenen Potentialen (3.42).

### 3.3 Effective-range Theorie

Die Streuung ultrakalter Atome an einer glatten Wand ist zwar mit Hilfe der Quantenreflexion gut verstanden, Experimente dieser Art haben aber den Nachteil, dass nur schwer Aussagen über die Streuphase bzw. die mittlere Streulänge  $\bar{a}$  (3.31) getroffen werden können. Durch Streuexperimente an gekrümmten Oberflächen, wie z.B. einer Kugel oder einem Draht, kann dieses Problem umgangen werden. Physikalische Observablen wie z.B. der Wirkungsquerschnitt  $\sigma$  sind abhängig von dem Streuwinkel  $\theta$  und liefern eine zusätzliche Möglichkeit, um relevante Größen aus einem Streuexperiment bestimmen zu können. Die Beiträge der einzelnen Partialwellen zum Wirkungsquerschnitt sind abhängig von der Drehimpulsquantenzahl  $l$ , die für (asymptotisch) exponentiell abfallende Potentiale durch das Schwellengesetz

von Wigner,

$$\tan \delta_l(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\propto} k^{2l+1} \propto E^{l+1/2}, \quad (3.51)$$

beschrieben werden [71].

Für Potentiale, die asymptotisch wie eine Potenz abfallen, also insbesondere auch homogene Potentiale  $\pm \beta_\alpha^{\alpha-2}/r^\alpha$ , ist diese Aussage nicht mehr für alle  $l$  gültig, worauf wir ausführlich in Abschnitt 3.4 eingehen werden.

Um den Einfluss höherer Partialwellen auf den Wirkungsquerschnitt untersuchen zu können, ist es notwendig, neben dem führenden Term auch den nächsthöheren Term der  $s$ -Wellenstreuung zu betrachten, den wir in diesem Abschnitt bestimmen. Hierfür erweitern wir die effective-range Theorie der gewöhnlichen elastischen Streuung, z.B. [26],

$$\frac{k}{\tan \delta_{l=0}(k)} \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -\frac{1}{a_0} + \frac{1}{2} r_{\text{eff},0} k^2, \quad (3.52)$$

mit der effektiven Reichweite  $r_{\text{eff},0}$ , auf den Fall der Quantenreflexion an attraktiven, singulären Potentialen und bestimmen nach den allgemeinen Aussagen diesen Term analytisch für homogene Potentiale  $-\beta_\alpha^{\alpha-2}/r^\alpha$ .

### 3.3.1 Effective-range Theorie für Quantenreflexion

Betrachten wir zunächst allgemein die radiale Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen der Masse  $\mathcal{M}$  und der Energie  $E = \hbar^2 k^2 / (2\mathcal{M})$  unter dem Einfluss eines Potentials  $V(r)$

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{2\mathcal{M}}{\hbar^2} V(r) \right) u(r) = 0, \quad (3.53)$$

für den Fall der  $s$ -Wellenstreuung (d.h.  $l = 0$ ). Das Potential soll asymptotisch (für  $r \rightarrow \infty$ ) verschwinden und attraktiver sein als  $-1/r^2$ , so dass wir die Randbedingungen für die Schrödinger-Gleichung analog zu Gleichung (3.21) wählen können:

$$u(r) \stackrel{r \rightarrow 0}{\sim} \frac{A}{\sqrt{p_k(r)}} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_{r_0}^r p_k(r') dr' \right], \quad (3.54a)$$

$$u(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} B (e^{-ikr} + R_{l=0}(k) e^{+ikr}). \quad (3.54b)$$

$p_k(r) = \sqrt{2\mathcal{M}[E - V(r)]}$  ist der lokale (von der Wellenzahl  $k$  abhängige) klassische Impuls und  $B$  ist ein beliebiger Parameter, den wir als  $1/(1 + R_{l=0}(k))$  wählen, so dass wir für Gleichung (3.54b) und deren Ableitung

$$u(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \left[ e^{+ikr} - \frac{2i \sin(kr)}{1 + R_{l=0}(k)} \right], \quad (3.55a)$$

$$\frac{du}{dr} \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} ik \left[ e^{+ikr} - \frac{2 \cos(kr)}{1 + R_{l=0}(k)} \right] \quad (3.55b)$$

schreiben können. Für  $r \rightarrow 0$  ergibt die Ableitung von (3.54a):

$$\frac{du}{dr} \stackrel{r \rightarrow 0}{\sim} -u(r) \left[ \frac{p'_k(r)}{2p_k(r)} + \frac{i}{\hbar} p_k(r) \right]. \quad (3.56)$$

Im nächsten Schritt betrachten wir zwei Lösungen  $u_1(r)$  und  $u_2(r)$  der Schrödinger-Gleichung (3.53) zu den Wellenzahlen  $k_1$  bzw.  $k_2$ :

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + k_1^2 - \frac{2\mathcal{M}}{\hbar^2} V(r) \right) u_1(r) = 0, \quad (3.57a)$$

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + k_2^2 - \frac{2\mathcal{M}}{\hbar^2} V(r) \right) u_2(r) = 0. \quad (3.57b)$$

Multiplizieren wir Gleichung (3.57a) mit  $u_2(r)$  (bzw. Gleichung (3.57b) mit  $u_1(r)$ ), liefert die Differenz dieser beiden Gleichungen die Differentialgleichung

$$u_1(r)u_2''(r) - u_2(r)u_1''(r) = (k_1^2 - k_2^2)u_1(r)u_2(r), \quad (3.58)$$

die wir auf beiden Seiten integrieren:

$$\begin{aligned} \int_{r_l}^{r_u} \left[ u_1(r) \frac{d^2 u_2}{dr^2} - u_2(r) \frac{d^2 u_1}{dr^2} \right] dr &= \left[ u_1(r) \frac{du_2}{dr} - u_2(r) \frac{du_1}{dr} \right]_{r_l}^{r_u} = \\ &= (k_1^2 - k_2^2) \int_{r_l}^{r_u} u_1(r)u_2(r) dr. \end{aligned} \quad (3.59)$$

Werten wir diese Gleichung an der unteren Grenze  $r_l$  aus,

$$u_1(r_l)u_2'(r_l) - u_2(r_l)u_1'(r_l) = u_1(r_l)u_2(r_l) \left[ \frac{p'_{k_1}(r_l)}{2p_{k_1}(r_l)} - \frac{p'_{k_2}(r_l)}{2p_{k_2}(r_l)} + \frac{i}{\hbar} [p_{k_1}(r_l) - p_{k_2}(r_l)] \right], \quad (3.60)$$

verschwindet der Beitrag im Limes  $r_l \rightarrow 0$ . Deutlich wird dies am Beispiel der homogenen singulären Potentiale  $-1/r^\alpha$ ,  $\alpha > 2$ . Mit

$$p_k(r) = (\hbar/\beta_\alpha)(\beta_\alpha/r)^{\alpha/2} \sqrt{1 + k^2 r^\alpha / (\beta_\alpha)^{\alpha-2}} \quad (3.61)$$

folgt für (3.60),

$$\begin{aligned} u_1(r)u_2'(r) - u_2(r)u_1'(r) &\stackrel{r \rightarrow 0}{\sim} u_1(r)u_2(r) \left[ \frac{\alpha}{4r} \left( \frac{1}{1 + k_2^2 r^\alpha / (\beta_\alpha)^{\alpha-2}} - \frac{1}{1 + k_1^2 r^\alpha / (\beta_\alpha)^{\alpha-2}} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{i(\beta_\alpha)^{\alpha/2-1}}{r^{\alpha/2}} \left( \sqrt{1 + k_1^2 r^\alpha / (\beta_\alpha)^{\alpha-2}} - \sqrt{1 + k_2^2 r^\alpha / (\beta_\alpha)^{\alpha-2}} \right) \right] = \\ &= u_1(r)u_2(r) [\mathcal{O}(r^{\alpha-1}) + \mathcal{O}(r^{\alpha/2})]. \end{aligned} \quad (3.62)$$

$u_1$  (bzw.  $u_2$ ) ist für  $r \rightarrow 0$  von der Ordnung  $\mathcal{O}(r^{\alpha/4})$ . Damit ist das Produkt aus beiden proportional zu  $r^{\alpha/2}$  und die rechte Seite verschwindet im Limes  $r \rightarrow 0$ .

Im nächsten Schritt wiederholen wir dieses Verfahren für zwei Lösungen  $v_1(r)$  und  $v_2(r)$  zu den Wellenzahlen  $k_1$  und  $k_2$  der freien Schrödinger-Gleichung ( $V(r) \equiv 0$ ), die sich asymptotisch ( $r \rightarrow \infty$ ) wie  $u_1(r)$  bzw.  $u_2(r)$  aus Gleichung (3.55) verhalten sollen:

$$v_1(r) \stackrel{\text{Def.}}{=} e^{ik_1 r} - \frac{2i \sin(k_1 r)}{1 + R_{l=0}(k_1)}, \quad v_2(r) \stackrel{\text{Def.}}{=} e^{ik_2 r} - \frac{2i \sin(k_2 r)}{1 + R_{l=0}(k_2)}. \quad (3.63)$$

Für diese Lösungen folgt analog zu oben:

$$\begin{aligned} \int_{r_l}^{r_u} \left[ v_1(r) \frac{d^2 v_2}{dr^2} - v_2(r) \frac{d^2 v_1}{dr^2} \right] dr &= \left[ v_1(r) \frac{dv_2}{dr} - v_2(r) \frac{dv_1}{dr} \right]_{r_l}^{r_u} \\ &= (k_1^2 - k_2^2) \int_{r_l}^{r_u} v_1(r)v_2(r) dr. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Die Differenz aus den Gleichungen (3.59) und (3.64)

$$\begin{aligned} \left[ v_1(r) \frac{dv_2}{dr} - v_2(r) \frac{dv_1}{dr} \right]_{r_l}^{r_u} - \left[ u_1(r) \frac{du_2}{dr} - u_2(r) \frac{du_1}{dr} \right]_{r_l}^{r_u} &= \\ = (k_1^2 - k_2^2) \int_{r_l}^{r_u} [v_1(r)v_2(r) - u_1(r)u_2(r)] dr, \end{aligned} \quad (3.65)$$

kann jetzt an den jeweiligen Integrationsgrenzen ausgewertet werden. Die Beiträge auf der linken Seite von Gleichung (3.65) heben sich für  $r_u \rightarrow \infty$  auf, da die  $u_i$  und  $v_i$  ( $i = 1, 2$ ) asymptotisch gleich sind. Der Beitrag von  $u_1$  und  $u_2$  an der unteren Grenze  $r_l \rightarrow 0$  verschwindet, wie oben gezeigt wurde. Bleibt nur noch der Beitrag von  $v_1$  und  $v_2$  an der Grenze  $r_l$ , den wir mit der Definition (3.63) bestimmen können,

$$-v_1(r_l) \frac{dv_2}{dr} \Big|_{r_l} + v_2(r_l) \frac{dv_1}{dr} \Big|_{r_l} \stackrel{r_l \rightarrow 0}{\sim} i(k_1 - k_2) + 2i \left( \frac{k_2}{1 + R_{l=0}(k_2)} - \frac{k_1}{1 + R_{l=0}(k_1)} \right). \quad (3.66)$$

Insgesamt vereinfacht sich Gleichung (3.65) für die Grenzwerte  $r_l \rightarrow 0$ ,  $r_u \rightarrow \infty$  zu

$$\begin{aligned} & i(k_1 - k_2) + 2i \left( \frac{k_2}{1 + R_{l=0}(k_2)} - \frac{k_1}{1 + R_{l=0}(k_1)} \right) = \\ & = (k_1^2 - k_2^2) \int_0^\infty [v_1(r)v_2(r) - u_1(r)u_2(r)] dr. \end{aligned} \quad (3.67)$$

Dieser Ausdruck ist für jedes Paar  $(k_1, k_2)$  gültig, insbesondere auch für den Limes  $k_2 \rightarrow 0$ , der sich aus den Gleichungen (3.28) und (3.30) ergibt:

$$1 + R_{l=0}(k_2) \rightarrow 2i\mathcal{A}k_2. \quad (3.68)$$

Der Quotient  $2ik_2/(1 + R_{l=0}(k_2))$  nimmt also für  $k_2 \rightarrow 0$  den konstanten Wert  $1/\mathcal{A}$  an und Gleichung (3.67) wird zu (wir verzichten jetzt auf den Index 1)

$$-\frac{2ik}{1 + R_{l=0}(k)} + ik = -ik \frac{1 - R_{l=0}(k)}{1 + R_{l=0}(k)} = -\frac{1}{\mathcal{A}} + k^2 \int_0^\infty [v(r)v_0(r) - u(r)u_0(r)] dr, \quad (3.69)$$

wobei  $u_0$  und  $v_0$  für Lösungen der Schrödinger-Gleichung mit und ohne Potential an der Schwelle  $k = 0$  stehen. Im Limes  $k \rightarrow 0$  werden die Lösungen  $u$  und  $v$  unabhängig von der Wellenzahl  $k$  und wir können in guter Näherung  $v(r) \approx v_0(r)$  annehmen. Mit der Definition (3.22) lässt sich das Schwellenverhalten (3.69) in Analogie zu Gleichung (3.52) als

$$\frac{k}{\tan \delta_{l=0}(k)} \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -\frac{1}{\mathcal{A}} + \frac{1}{2} \mathcal{R}_{\text{eff},0} k^2, \quad (3.70)$$

schreiben, wobei die jetzt komplexe effektive Reichweite  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}$  durch das Integral (3.69) bei  $k = 0$  definiert ist

$$\mathcal{R}_{\text{eff},0} = 2 \int_0^\infty [v_0^2(r) - u_0^2(r)] dr. \quad (3.71)$$

Die Funktionen  $v_0$  und  $u_0$  sind durch das asymptotische Verhalten (3.55b) im Limes  $k \rightarrow 0$  definiert:

$$v_0(r) = 1 - \frac{r}{\mathcal{A}}, \quad u_0(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} 1 - \frac{r}{\mathcal{A}}. \quad (3.72)$$

Eine Entwicklung von (3.70) liefert die führenden Beiträge zur Streuphase  $\delta_{l=0}(k)$  bis einschließlich der Ordnung  $\mathcal{O}(k^3)$ :

$$\delta_{l=0}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -k\mathcal{A} + \frac{1}{3} (k\mathcal{A})^3, \quad \Lambda = \left( 1 - \frac{3}{2} \frac{\mathcal{R}_{\text{eff},0}}{\mathcal{A}} \right)^{1/3} \mathcal{A}. \quad (3.73)$$

Das einfachste Beispiel für diese Theorie ist wieder das Stufenpotential (3.34). Für die einlaufenden Randbedingungen (3.37) mit der Reflexion (3.38) ist die Streuphase  $\delta(k)$  (mit  $q^2 = k^2 + k_0^2$ )

$$\delta(k) = -kL - \frac{i}{2} \ln \left( \frac{q-k}{q+k} \right) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -k \left( L - \frac{i}{k_0} \right) - \frac{i}{6} \left( \frac{k}{k_0} \right)^3, \quad (3.74)$$



und für die Parameter aus Gleichung (3.73) erhalten wir:

$$\mathcal{A} = L - \frac{i}{k_0}, \quad \mathcal{R}_{\text{eff},0} = \frac{2}{3}\mathcal{A} + \frac{i}{3k_0^3\mathcal{A}^2}, \quad \Lambda = \frac{i}{2^{1/3}k_0}. \quad (3.75)$$

Zum Vergleich hierfür dieselben Parameter für die Randbedingungen (3.35) und der Reflexion (3.36), die auf Grund der Teilchenerhaltung reell sind:

$$\delta_{l=0}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -ka_0 + \frac{1}{3}(k\lambda)^3, \quad \lambda = \left(1 - \frac{3}{2}\frac{r_{\text{eff},0}}{a_0}\right)^{1/3} a_0, \quad (3.76)$$

$$a_0 = L - \frac{\tan(k_0 L)}{k_0}, \quad r_{\text{eff},0} = L - \frac{L^3}{3a_0^2} - \frac{1}{k_0^2 a_0}, \quad \lambda = \frac{(2a_0^3 k_0^3 - 3La_0^2 k_0^3 - L^3 k_0^3 + 3k_0 a_0)^{1/3}}{2^{1/3} k_0}. \quad (3.77)$$

### 3.3.2 Effective-range Theorie für homogene Potentiale

Aber nicht nur für das Stufenpotential, sondern auch für die homogenen, singulären Potentiale (3.42) können analytische Ausdrücke für  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}$  gefunden werden. Dies ist insbesondere dann von Bedeutung, wenn das tatsächliche Potential nur im semiklassischen Gebiet bei  $r \rightarrow 0$  von einem homogenen Potential abweicht. Um die Quantenreflexion zu bestimmen, kann in diesem Fall das gesamte Potential als homogen angenommen werden.

Zur Herleitung der effektiven Reichweite  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}$  benötigen wir zunächst die Lösung  $u_0$  bei der Energie  $E = 0$ , die sich asymptotisch wie Gleichung (3.72) verhält.  $u_0$  können wir durch eine Linearkombination von Bessel-Funktionen der Ordnung  $\nu = 1/(\alpha - 2)$  und dem Argument  $z = 2\nu(\beta_\alpha/r)^{1/(2\nu)}$  darstellen (vgl. (3.44) und (3.45)):

$$u_0(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\Gamma(1 + \nu)}{\nu^\nu} \sqrt{\frac{r}{\beta_\alpha}} J_\nu(z) - \frac{\beta_\alpha}{\mathcal{A}_\alpha} \Gamma(1 - \nu) \nu^\nu \sqrt{\frac{r}{\beta_\alpha}} J_{-\nu}(z). \quad (3.78)$$

Die Entwicklung der Bessel-Funktionen für  $r \rightarrow \infty$ , d.h.  $z \rightarrow 0$ , [75],

$$u_0(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} 1 - \frac{(z/2)^2}{1 + \nu} + \mathcal{O}(z^4) - \frac{r}{\mathcal{A}_\alpha} \left(1 - \frac{(z/2)^2}{1 - \nu} + \mathcal{O}(z^4)\right) = 1 - \frac{r}{\mathcal{A}_\alpha} + \mathcal{O}(r^{3-\alpha}), \quad (3.79)$$

zeigt, dass der führende Term von  $v_0^2(r) - u_0^2(r)$  proportional zu  $r^{\alpha-4}$  und das Integral in (3.71) für  $\alpha > 5$  endlich ist.

Flambaum *et al.* [76] haben dieses Integral bereits bestimmt, indem sie die Beiträge von  $v_0^2(r)$  und  $u_0^2(r)$  einzeln betrachtet und gezeigt haben, dass sich die jeweiligen Divergenzen durch die Differenz aufheben. Da wir dieses Verfahren allerdings auch im zwei-dimensionalen Fall verwenden, stellen wir es hier noch einmal vor. Für den Beitrag von  $v_0^2(r)$  erhalten wir

$$\int_0^r v_0^2(r') dr' = r - \frac{r^2}{\mathcal{A}_\alpha} + \frac{r^3}{3\mathcal{A}_\alpha^2}, \quad (3.80)$$

der offensichtlich im Limes  $r \rightarrow \infty$  divergiert. Jeder dieser drei Terme muss durch einen entsprechenden Anteil von  $u_0^2(r)$  aufgehoben werden, um ein endliches  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}$  zu erhalten. Zur Bestimmung von  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}$  berechnen wir zunächst mit Gleichung (3.78) das unbestimmte Integral:

$$\begin{aligned} \int u_0^2(r) dr &= -\nu^{2\nu+1} 2^{4\nu+1} \beta_\alpha \left( \Gamma^2(1 + \nu) \int z^{-4\nu-1} J_\nu^2(z) dz - \right. \\ &\quad - \frac{2\beta_\alpha \nu^{2\nu}}{\mathcal{A}_\alpha} \Gamma(1 + \nu) \Gamma(1 - \nu) \int z^{-4\nu-1} J_\nu(z) J_{-\nu}(z) dz - \\ &\quad \left. + \frac{\beta_\alpha^2 \nu^{4\nu}}{\mathcal{A}_\alpha^2} \Gamma^2(1 - \nu) \int z^{-4\nu-1} J_{-\nu}^2(z) dz \right). \end{aligned} \quad (3.81)$$

Die hier auftretenden Integrale der Form  $\int z^{-4\nu-1} J_\eta(z) J_\tau(z) dz$  lassen sich mit Hilfe der hypergeometrischen Funktion  ${}_3F_4$  analytisch lösen,<sup>5</sup>

$$\begin{aligned} \tilde{I}(z) &= \int z^{-4\nu-1} J_\eta(z) J_\tau(z) dz = \frac{2^{-\eta-\tau} z^{-4\nu+\eta+\tau}}{(-4\nu+\eta+\tau)\Gamma(1+\eta)\Gamma(1+\tau)} \times \\ &\times {}_3F_4 \left( \begin{matrix} 1+\eta, & \frac{1+\eta+\tau}{2}, & \frac{2+\eta+\tau}{2}, & \frac{-4\nu+\eta+\tau}{2} \\ 1+\eta, & 1+\frac{-4\nu+\eta+\tau}{2}, & 1+\tau, & 1+\eta+\tau \end{matrix} \middle| -z^2 \right) \end{aligned} \quad (3.82)$$

und wir können die Grenzwerte  $z \rightarrow 0$  und  $z \rightarrow \infty$  bilden:

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \tilde{I}(z) = \frac{2^{-1-4\nu} \Gamma(1+4\nu) \Gamma(\frac{-4\nu+\eta+\tau}{2})}{\Gamma(1+\frac{4\nu+\eta-\tau}{2}) \Gamma(1+\frac{4\nu-\eta+\tau}{2}) \Gamma(1+\frac{4\nu+\eta+\tau}{2})}, \quad (3.83)$$

$$\lim_{z \rightarrow 0} \tilde{I}(z) = z^{-4\nu+\eta+\tau} \left( \frac{2^{-\eta-\tau}}{(-4\nu+\eta+\tau)\Gamma(1+\eta)\Gamma(1+\tau)} + \mathcal{O}(z^2) \right). \quad (3.84)$$

Somit gilt z.B für  $\eta = \tau = \nu$  und  $z = 2\nu(\beta_\alpha/r)^{1/(2\nu)}$ :

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \tilde{I}(r) = -\frac{r}{\beta_\alpha} \left( \frac{2^{-4\nu-1} \nu^{-2\nu-1}}{\Gamma^2(1+\nu)} + \mathcal{O}(r^{-1/\nu}) \right), \quad (3.85)$$

so dass das erste Integral auf der rechten Seite von (3.81) insgesamt den Beitrag  $r$  liefert und zusammen mit dem ersten Term in (3.80) exakt verschwindet. Werten wir dieses Integral für  $z \rightarrow \infty$ , also für  $r \rightarrow 0$  aus, bleibt der konvergente Anteil

$$\frac{1}{3} \frac{\pi \nu^{2\nu}}{\sin(\pi \nu)} \frac{\Gamma(\nu) \Gamma(4\nu)}{\Gamma^2(2\nu) \Gamma(3\nu)} \beta_\alpha. \quad (3.86)$$

Ebenso können wir mit den letzten beiden Termen in (3.81) verfahren, die die restlichen divergenten Anteile in (3.80) aufheben und wir erhalten für  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}$  in (3.71):

$$\frac{\mathcal{R}_{\text{eff},0}}{\beta_\alpha} = f_\alpha - g_\alpha \frac{\beta_\alpha}{\mathcal{A}_\alpha} + h_\alpha \left( \frac{\beta_\alpha}{\mathcal{A}_\alpha} \right)^2. \quad (3.87)$$

Setzen wir alle Längen in diesem Ausdruck in Bezug zu  $\beta_\alpha$ , lassen sich die Koeffizienten in (3.87) mit Hilfe von dimensionslosen Größen ausdrücken:

$$f_\alpha = \frac{2}{3} \frac{\pi \nu^{2\nu}}{\sin(\pi \nu)} \frac{\Gamma(\nu) \Gamma(4\nu)}{\Gamma^2(2\nu) \Gamma(3\nu)}, \quad (3.88a)$$

$$g_\alpha = \frac{4}{3} \frac{\pi \nu^{4\nu}}{\sin(\pi \nu)} \frac{\Gamma(1-2\nu) \Gamma(4\nu)}{\nu \Gamma(\nu) \Gamma(2\nu) \Gamma(3\nu)}, \quad (3.88b)$$

$$h_\alpha = \frac{2}{3} \frac{\pi \nu^{6\nu}}{\sin(\pi \nu)} \frac{\Gamma(1-3\nu) \Gamma(1-\nu) \Gamma(4\nu)}{\nu^2 \Gamma^2(\nu) \Gamma^2(2\nu)}. \quad (3.88c)$$

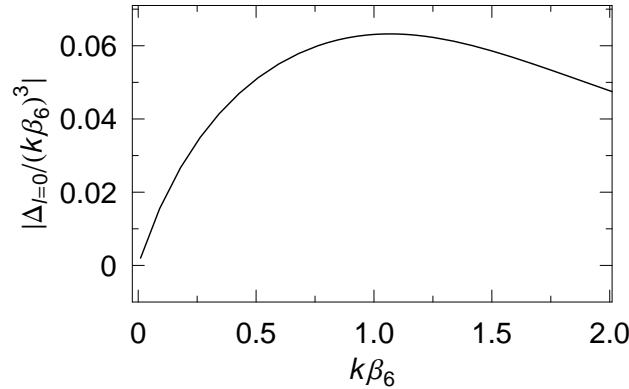
Insgesamt nimmt  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}$  für homogene Potentiale die Form

$$\mathcal{R}_{\text{eff},0} = \frac{2}{3} \mathcal{A}_\alpha \frac{\Gamma^2(1-2\nu) \Gamma(1-3\nu) \Gamma(1+\nu)}{\Gamma(1-4\nu) \Gamma^2(1-\nu)} \quad (3.89)$$

an und der Parameter  $\Lambda_\alpha$  aus (3.73), der die Stärke der nächsthöheren Ordnung in  $k$  der Streuphase beschreibt, hat die Gestalt

$$\frac{\Lambda_\alpha}{\mathcal{A}_\alpha} = \left[ 1 - \frac{\Gamma^2(1-2\nu) \Gamma(1-3\nu) \Gamma(1+\nu)}{\Gamma(1-4\nu) \Gamma^2(1-\nu)} \right]^{1/3}. \quad (3.90)$$

<sup>5</sup>Sonderfälle, wie z.B.  $\eta, \tau \in \mathbb{N}$ , die z.B. in der zwei-dimensionalen effective-range Theorie auftreten, betrachten wir an der jeweiligen Stelle gesondert.



**Abbildung 3.8:** Differenz (3.91) zwischen der numerisch berechneten Streuphase und der analytischen Lösung (3.73) für  $\alpha = 6$  und  $l = 0$  als Funktion des dimensionslosen Parameters  $k\beta_6$ . Im Limes  $k \rightarrow 0$  strebt  $|\Delta_{l=0}(k\beta_6)/(k\beta_6)^3|$  gegen Null, so dass alle Beiträge bis einschließlich der Ordnung  $\mathcal{O}(k^3)$  richtig sind.

Dieses Ergebnis kann durch numerisches Lösen der Schrödinger-Gleichung (3.53) geprüft werden, indem wir z.B. für  $\alpha = 6$  die Differenz aus  $\Delta_{l=0}(k\beta_6)$  der numerischen Lösung  $\delta_{\text{num}}(k\beta_6)$  und der analytischen Lösung  $\delta_{\text{ana}}(k\beta_6)$  betrachten:

$$\Delta_{l=0}(k\beta_6) = \delta_{\text{num}}(k\beta_6) - \delta_{\text{ana}}(k\beta_6) . \quad (3.91)$$

Abbildung 3.8 zeigt  $\Delta_{l=0}(k\beta_6)$  geteilt durch  $(k\beta_6)^3$ . Für  $k\beta_6 \rightarrow 0$  konvergiert der Betrag  $|\Delta_{l=0}(k\beta_6)/(k\beta_6)^3|$  zu Null, so dass bis einschließlich der Ordnung  $\mathcal{O}(k^3)$  Gleichung (3.70) richtig ist.

Einen ersten Hinweis auf die Analogie zwischen der Streuung an repulsiven und der Quantenreflexion an attraktiven, singulären Potentialen liefert die Tatsache, dass  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}$  ein reelles Vielfaches der Streulänge  $\mathcal{A}_\alpha$  ist, obwohl beide Größen komplex sind.<sup>6</sup> Auf diesen Zusammenhang gehen wir in den nächsten Abschnitten noch ausführlich ein. Das Verhältnis  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}/\mathcal{A}_\alpha$  nimmt für  $\alpha \rightarrow \infty$  ( $\nu \rightarrow 0$ ) den Wert  $2/3$  an, so dass die Korrekturen der Ordnung  $\mathcal{O}(k^3)$  in (3.73) bzw. äquivalent dazu im Ausdruck

$$R_{l=0}(k) = -e^{-2b_\alpha k} e^{2i\bar{a}_\alpha k} [1 + \mathcal{O}((k\beta_\alpha)^3)] , \quad (3.92)$$

für zunehmende  $\alpha$  immer kleiner werden (die wachsende Genauigkeit des Exponentialterms in (3.92) mit größer werdenden  $\alpha$  wurde bereits in [77] festgestellt).

In Tabelle 3.2 sind die numerischen Werte der mittleren Streulänge  $\bar{a}_\alpha$ , der Schwellenlänge  $b_\alpha$  sowie das Verhältnis  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}/\mathcal{A}_\alpha$  und  $\Lambda_\alpha/\mathcal{A}_\alpha$  für verschiedene  $\alpha$  aufgeführt. Die Konstante  $c_\infty$  in der letzten Zeile und Spalte folgt aus der Entwicklung der  $\Gamma$ -Funktion in (3.90) für kleine  $\nu$ , bei der der niedrigste nichtverschwindende Beitrag in der Klammer  $(c_\infty\nu)^3$  ist, mit

$$c_\infty = (8\gamma^3 - 12\gamma\Gamma''(1) - 4\Gamma'''(1))^{1/3} = 2.12653077\dots \quad (3.93)$$

<sup>6</sup>Dies ist keine generelle Eigenschaft von Quantenreflexionsamplituden, da diese Aussage für den Fall des Stufenpotentials nicht mehr gilt, vgl. (3.75).

$\alpha$	6	7	8	9	$\alpha \rightarrow \infty$
$\bar{a}_\alpha/\beta_\alpha$	0.4779888	0.5388722	0.5798855	0.6108042	1
$b_\alpha/\beta_\alpha$	0.4779888	0.3915136	0.3347971	0.2941478	$\pi/(\alpha - 2)$
$\mathcal{R}_{\text{eff},0}/\mathcal{A}_\alpha$	0	0.4839001	0.5888796	0.6259995	$\frac{2}{3}$
$\Lambda_\alpha/\mathcal{A}_\alpha$	1	0.6496249	0.4886519	0.3936512	$c_\infty/(\alpha - 2)$

**Tabelle 3.2:** Mittlere Streulänge  $\bar{a}_\alpha$ , Schwellenlänge  $b_\alpha$  sowie Realteil und Imaginärteil der komplexen Streulänge  $\mathcal{A}_\alpha = \bar{a}_\alpha - ib_\alpha$  für Quantenreflexion an den homogenen Potentialen (3.42). Ebenso ist das Verhältnis zwischen  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}$  und  $\mathcal{A}_\alpha$  angegeben sowie der Quotient  $\Lambda_\alpha/\mathcal{A}_\alpha$ , wobei  $\Lambda_\alpha$  den nächsthöheren Beitrag im Schwellenverhalten der komplexen Streuphase beschreibt (3.73). Die Konstante  $c_\infty$  in der letzten Reihe ist durch Gleichung (3.93) gegeben.

### 3.3.3 Vergleich zwischen repulsiven und attraktiven, singulären Potentialen

Wie bereits im vorherigen Abschnitt angedeutet, besteht ein Zusammenhang zwischen Quantenreflexion an attraktiven, singulären Potentialen und der Streuung an den entsprechenden repulsiven, singulären Potentialen:

$$V_\alpha^{(\text{rep})}(r) = -V_\alpha(r) = \frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}} \frac{(\beta_\alpha)^{\alpha-2}}{r^\alpha}, \quad \alpha > 2. \quad (3.94)$$

Für repulsive Potentiale untersuchten del Giudice und Galzenati [27] das Schwellenverhalten der Streuphase  $\delta_{l=0}^{(\text{rep})}(k)$  für die  $s$ -Wellenstreuung, indem sie eine Entwicklung der regulären Lösung  $\psi_{\text{reg}}(r)$  und eine entsprechende Entwicklung der sog. Jost-Lösungen für  $r \rightarrow \infty$  bestimmten.<sup>7</sup>  $\psi_{\text{reg}}(r)$  kann nahe dem Ursprung durch WKB-Wellen beschrieben werden,

$$\psi_{\text{reg}}(r) \stackrel{r \rightarrow 0}{\propto} \frac{1}{\sqrt{p_k^{(\text{rep})}(r)}} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_r^{r_0} p_k^{(\text{rep})}(r') dr' \right], \quad (3.95)$$

wobei für repulsive Potentiale  $p_k^{(\text{rep})}(r) = \left| \hbar \sqrt{k^2 - (\beta_\alpha)^{\alpha-2}/r^\alpha} \right|$  der Betrag des lokalen klassischen Impulses im klassisch verbotenen Bereich ist. Ein Anpassen der regulären Lösung (3.95) an den asymptotischen Ausdruck

$$\psi_{\text{reg}}(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \sin(kr) + \tan \delta_{l=0}^{(\text{rep})}(k) \cos(kr) \propto e^{-ikr} - e^{2i\delta_{l=0}^{(\text{rep})}(k)} e^{+ikr} \quad (3.96)$$

führt zu folgendem Schwellenverhalten von  $\tan \delta_{l=0}^{(\text{rep})}(k)$ ,

$$\tan \delta_{l=0}^{(\text{rep})}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{\Gamma(-\nu)}{\Gamma(\nu)} \nu^{2\nu} k \beta_\alpha + \frac{\Gamma(-\nu) \Gamma(-2\nu)^2 \Gamma(-3\nu)}{\Gamma(\nu)^2 \Gamma(-4\nu)} \nu^{1+6\nu} (k \beta_\alpha)^3. \quad (3.97)$$

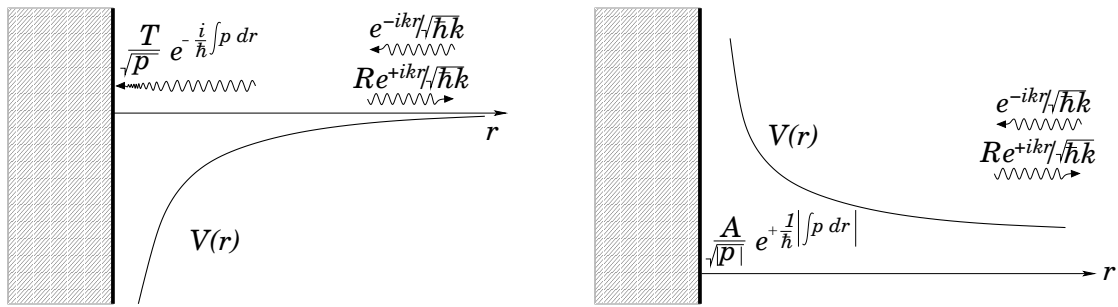
Für  $\alpha > 5$  ist dies die gewöhnliche effective-range Entwicklung (3.52)

$$\frac{k}{\tan \delta_{l=0}^{(\text{rep})}(k)} \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -\frac{1}{a_\alpha^{(\text{rep})}} + \frac{1}{2} r_{\text{eff},0} k^2, \quad (3.98)$$

mit der Streulänge

$$a_\alpha^{(\text{rep})} = \nu^{2\nu} \frac{\Gamma(1-\nu)}{\Gamma(1+\nu)} \beta_\alpha \quad (3.99)$$

<sup>7</sup>Auf diese Theorie gehen wir ausführlich in Abschnitt 3.4 ein und beschränken uns hier nur auf die Ergebnisse.



**Abbildung 3.9:** Schematische Darstellung der Randbedingungen für attraktive, singuläre Potentiale im Vergleich zu repulsiven, singulären Potentialen.

und der effektiven Reichweite  $r_{\text{eff},0}$

$$r_{\text{eff},0} = 2a_{\alpha}^{(\text{rep})} \frac{\Gamma(-2\nu)^2 \Gamma(-3\nu) \nu^2 \Gamma(1+\nu)}{\Gamma(-4\nu) \Gamma(1-\nu)^2}. \quad (3.100)$$

Das repulsive homogene Potential (3.94) wird zu dem attraktiven Potential (2.29), wenn wir  $(\beta_{\alpha})^{\alpha-2}$  durch  $-(\beta_{\alpha})^{\alpha-2}$  ersetzen,<sup>8</sup>

$$(\beta_{\alpha})^{\alpha-2} \longrightarrow -(\beta_{\alpha})^{\alpha-2} = e^{-i\pi} (\beta_{\alpha})^{\alpha-2}, \quad \beta_{\alpha} \longrightarrow \beta_{\alpha} e^{-i\pi\nu}. \quad (3.101)$$

Ebenso wird die reguläre Wellenfunktion  $\psi_{\text{reg}}$  zu einer komplexen Wellenfunktion  $\psi_{\text{in}}$ , deren Verhalten nahe dem Ursprung einer einwärts laufenden WKB-Welle entspricht,

$$\psi_{\text{reg}}(r) \longrightarrow \psi_{\text{in}}(r) \stackrel{r \rightarrow 0}{\propto} \frac{1}{\sqrt{p_k(r)}} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_r^{r_0} p_k(r') dr' \right] \quad (3.102)$$

und gerade das Verhalten der Wellenfunktion für kleine  $r$  beschreibt, das wir nach Gleichung (3.21) zur Bestimmung von Quantenreflexionsamplituden benötigen.

Abbildung 3.9 zeigt einen Vergleich der beiden Randbedingungen für attraktive und repulsive singuläre Potentiale. In beiden Fällen werden Lösungen der Schrödinger-Gleichung für  $r \rightarrow 0$  durch WKB-Wellen beschrieben.

Die Substitution (3.101) liefert aber nicht nur den Zusammenhang zwischen den Randbedingungen, sondern mit ihr kann auch die komplexe Streuphase  $\delta_{l=0}(k)$  aus der reellen Streuphase  $\delta_{l=0}^{(\text{rep})}(k)$  bestimmt werden. Ersetzen wir in Gleichung (3.98)  $\beta_{\alpha}$  durch  $\beta_{\alpha} e^{-i\pi\nu}$  erhalten wir:

$$\tan \delta_{l=0}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{\Gamma(-\nu)}{\Gamma(\nu)} \nu^{2\nu} k \beta_{\alpha} e^{-i\pi\nu} + \frac{\Gamma(-\nu) \Gamma(-2\nu)^2 \Gamma(-3\nu)}{\Gamma(\nu)^2 \Gamma(-4\nu)} \nu^{1+6\nu} (k \beta_{\alpha} e^{-i\pi\nu})^3. \quad (3.103)$$

Dies entspricht dem Ergebnis aus Gleichung (3.70) mit der komplexen Streulänge (3.50) und der komplexen effektiven Reichweite (3.89). Während die Gleichungen (3.98) und (3.100) für das repulsive Potential aus (3.97) folgen, erhalten wir die entsprechenden Gleichungen für den attraktiven Fall aus (3.103), wenn wir  $\beta_{\alpha} e^{-i\pi\nu}$  anstelle von  $\beta_{\alpha}$  schreiben:

$$\frac{k}{\tan \delta_{l=0}(k)} \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -\frac{1}{a_{\alpha}^{(\text{rep})} e^{-i\pi\nu}} + \frac{1}{2} r_{\text{eff},0}^{(\text{rep})} e^{-i\pi\nu} k^2, \quad (3.104)$$

<sup>8</sup>An dieser Stelle ist die Ersetzung  $e^{+i\pi}$  für  $-1$  auch möglich. Ein Vergleich mit den numerischen Ergebnissen zeigt jedoch, dass dies nicht die richtigen Ergebnisse für die Streulänge und die effektive Reichweite liefert.

mit der komplexen effektiven Reichweite

$$\mathcal{R}_{\text{eff},0} = 2a_{\alpha}^{(\text{rep})} e^{-i\pi\nu} \frac{\Gamma(-2\nu)^2 \Gamma(-3\nu) \nu^2 \Gamma(1+\nu)}{\Gamma(-4\nu) \Gamma(1-\nu)^2} \quad (3.105)$$

und der komplexen Streulänge aus (3.50)

$$\mathcal{A}_{\alpha} = a_{\alpha}^{(\text{rep})} e^{-i\pi\nu} = \bar{a}_{\alpha} - i b_{\alpha}, \quad (3.106)$$

die sich aus der Schwellenlänge  $b_{\alpha}$  (3.48) und der mittleren Streulänge  $\bar{a}_{\alpha}$  (3.49) zusammensetzt.

### 3.4 Höhere Partialwellen: Die Jost-Funktionen

Mit Hilfe der effective-range Theorie aus Abschnitt 3.3 können wir für die  $s$ -Wellenstreuung den Beitrag der nächsthöheren Ordnung in der Wellenzahl  $k$  für die Streuphase  $\delta_{l=0}(k)$  im Fall der Quantenreflexion bestimmen, solange das Potential für  $r \rightarrow 0$  schneller abfällt als  $-1/r^5$ . Für Potentiale, die langsamer abfallen, ist diese Theorie jedoch nicht mehr anwendbar, da das Integral (3.71) nicht konvergiert. Ziel dieses Abschnittes ist es aber nicht nur, die Sonderfälle  $\alpha = 3, 4$  und  $5$  zu untersuchen, sondern auch den führenden Beitrag höherer Partialwellen  $l > 0$  (es handelt sich also nicht mehr um Quantenreflexion, sondern auf Grund der Zentrifugalbarriere um eine klassische erlaubte Reflexion) zum Streuquerschnitt  $\sigma$  zu berechnen.

Da die Schrödinger-Gleichung im Allgemeinen eine Differentialgleichung 2. Ordnung ist, benötigen wir für eine eindeutige Lösung zwei Randbedingungen, aus der wir die Streuphase extrahieren können. Im Fall der elastischen Streuung ist es üblich, als Randbedingungen für  $r \rightarrow 0$  die reguläre Lösung und deren Ableitung (bzw. für eine eindeutige Wahl für höhere Drehimpulse  $l$ , die  $(l+1)$ -te Ableitung) zu wählen und dann die Schrödinger-Gleichung (in den meisten Fällen) numerisch “nach außen” zu integrieren. Ein Vergleich dieser Lösung mit den Randbedingungen (3.11) für  $r \rightarrow \infty$  erlaubt die Bestimmung der Streuphase  $\delta_l(k)$ .

Eine alternative Methode zu diesem Verfahren wurde von Jost vorgeschlagen [78]: hierbei sind nicht die Randbedingungen bei  $r \rightarrow 0$  der Ausgangspunkt, sondern die zwei linear unabhängigen Lösungen  $e^{\pm ikr}$  für  $r \rightarrow \infty$ , die “nach innen” integriert werden müssen. Diese irregulären Lösungen der Schrödinger-Gleichung, die *Jost-Lösungen*  $f_{\pm}(k, r)$ , werden durch den Grenzwert

$$\lim_{r \rightarrow \infty} e^{\mp ikr} f_{\pm}(k, r) = 1 \quad (3.107)$$

definiert.<sup>9</sup> Die Jost-Lösungen zusammen mit der Lösung für  $r \rightarrow 0$  ermöglichen es, durch ein geeignetes Anpassen die *Jost-Funktionen*  $\mathcal{F}_{\pm}(k)$  zu bestimmen, aus denen sich die Streuphase berechnen lässt.

Die Theorie der Jost-Funktion wird in vielen Lehrbüchern behandelt (z.B. [70]), allerdings werden die meisten Anwendungen entweder auf sehr kurzreichweitige Potentiale beschränkt, die außerdem für  $r \rightarrow 0$  weniger singulär sind als  $1/r^2$  oder sie befassen sich mit rein repulsiven Potentialen (z.B. [79–81]). Hier spielt nur die reguläre Lösung eine Rolle, da die irreguläre Lösung unphysikalisch divergiert.

Diese Einschränkungen sind jedoch nicht nötig. Die Theorie ist sowohl auf attraktive, reguläre als auch auf attraktive, singuläre Potentiale anwendbar, solange die Randbedingungen für

<sup>9</sup>Im Gegensatz zu der von Jost ursprünglich eingeführten Definition [78] nutzen wir eine gebräuchlichere und intuitivere Definition der Jost-Lösungen. In seiner ursprünglichen Definition muss das Plus- und Minus-Zeichen vertauscht werden.

$r \rightarrow 0$  (physikalisch) sinnvoll definiert werden und eine eindeutige Festlegung der Streuphase möglich ist.<sup>10</sup>

Ähnlich wie im Abschnitt 3.3 erweitern wir in diesem Abschnitt die Theorie der Jost-Funktionen auf absorbierende Randbedingungen, bestimmen die Jost-Lösungen und Jost-Funktionen für homogene singuläre Potentiale analytisch und berechnen hieraus die führenden Terme der Streuphase  $\delta_l(k)$ . Abschließend vergleichen wir diese Ergebnisse wieder mit den Resultaten für repulsive Potentiale und zeigen, dass derselbe Zusammenhang wie im Fall der Quantenreflexion besteht.

### 3.4.1 Jost-Funktionen und die Matching-Methode

Eine grundlegende Eigenschaft der Jost-Lösungen (3.107) liegt darin, dass sie zwei linear unabhängige Lösungen (mit Ausnahme von  $k = 0$ ) der radialen Schrödinger-Gleichung

$$\frac{d^2 u_l(k, r)}{dr^2} + \left( k^2 - \frac{2\mathcal{M}}{\hbar^2} V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_l(k, r) = 0, \quad (3.108)$$

sind und somit ein Fundamentalsystem dieser Gleichung bilden. Da sie durch ihr asymptotisches Verhalten für  $r \rightarrow \infty$  definiert sind, lässt sich jede weitere Lösung dieser Differentialgleichung als Linearkombination der beiden Funktionen darstellen. Um die Randbedingungen bei  $r = 0$  zu erfüllen, können die Jost-Lösungen an einem beliebigen Punkt  $r = r_0$  an die Randbedingungen des jeweiligen Problems angepasst werden [71, 87–89].

Wie bisher betrachten wir Potentiale, die im Limes  $r \rightarrow \infty$  mindestens so schnell abfallen wie  $1/r^2$ , so dass die physikalische Lösung von (3.108) nach Gleichung (3.54b) durch freie Wellen beschrieben werden,

$$u_l(k, r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} A(e^{-ikr} - (-1)^l S_l(k) e^{ikr}), \quad (3.109)$$

mit der  $S$ -Matrix  $S_l(k)$ , die jetzt von der Drehimpulsquantenzahl  $l$  abhängig ist. Sie steht über die Relation

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)} = -(-1)^l R_l(k) \quad (3.110)$$

mit der Streuphase  $\delta_l(k)$  bzw. der Reflexionsamplitude  $R_l(k)$  in Verbindung.

Vergleichen wir die Definition (3.107) von  $f_{\pm}(k, r)$  mit der asymptotischen Lösung (3.109), so können die freien Wellen durch die Jost-Lösungen ersetzt werden,

$$u_l(k, r) = A(f_-(k, r) - (-1)^l S_l(k) f_+(k, r)), \quad (3.111)$$

wobei  $u_l(k, r)$  jetzt eine exakte Lösung der Schrödinger-Gleichung (3.108) ist und die  $S$ -Matrix zu berechnen ist. Diese hängt von der Wahl der Randbedingungen für  $r \rightarrow 0$  ab. Um  $S_l(k)$  zu bestimmen nehmen wir an, dass für  $r < r_0$  (mit einem beliebigen aber endlichen  $r_0$ ) die exakte Lösung  $u_l(k, r)$  von (3.111) bekannt ist und durch die Funktion  $u_{l,0}(k, r)$  beschrieben wird. Für eine eindeutige Definition der Normierung setzen wir  $u_{l,0}(k, 0) = 0$  und  $u_{l,0}^{(l+1)}(k, 0) = 1$ , bzw. für *attraktive* singuläre Potentiale,  $u_{l,0}^{(l+1)}(ik, 0) = 1$ .

Mit Hilfe der logarithmischen Ableitung (solange die Ableitung der Wellenfunktion stetig ist), können die Lösungen  $u_{l,0}(k, r)$  und  $u_l(k, r)$  an der Stelle  $r = r_0$  angepasst werden [87],

$$\left. \frac{u'_{l,0}(k, r)}{u_{l,0}(k, r)} \right|_{r=r_0} = \left. \frac{f'_-(k, r) - (-1)^l S_l(k) f'_+(k, r)}{f_-(k, r) - (-1)^l S_l(k) f_+(k, r)} \right|_{r=r_0} \quad (3.112)$$

<sup>10</sup>Streuphasen für attraktive, singuläre Potentiale ohne absorbierende Randbedingungen wurden auch schon von verschiedenen Autoren bestimmt [82–84], hängen aber von dem Modell ab, das zur Beschreibung des Potentials für kleine Abstände  $r$  verwendet wird [84–86]. In unserem Fall sind die Streuphasen durch die Festlegung auf einlaufende Randbedingungen eindeutig bestimmt und modellunabhängig.

und wir erhalten für die  $S$ -Matrix:

$$S_l(k) = (-1)^l \frac{f_-(k, r_0)u'_{l,0}(k, r_0) - f'_-(k, r)u_{l,0}(k, r_0)}{f_+(k, r_0)u'_{l,0}(k, r_0) - f'_+(k, r)u_{l,0}(k, r_0)}. \quad (3.113)$$

In diesem Zusammenhang definieren wir die *Jost-Funktionen*  $\mathcal{F}_\pm(k)$  als Wronski-Determinante  $W$  aus den Jost-Lösungen  $f_\pm(k, r)$  und der Lösung  $u_{l,0}(k, r)$ ,

$$\mathcal{F}_\pm(k) = W(f_\pm(k, r), u_{l,0}(k, r))|_{r=r_0}, \quad (3.114)$$

so dass wir äquivalent zu Gleichung (3.113) schreiben können:

$$S_l(k) = (-1)^l \frac{\mathcal{F}_-(k)}{\mathcal{F}_+(k)}. \quad (3.115)$$

Im Fall der elastischen  $s$ -Wellenstreuung durch nicht singuläre Potentiale sind die Lösungen  $u_{(0,0)}(k, r)$  bei  $r = r_0 = 0$  regulär und die Jost-Funktionen vereinfachen sich zu

$$\mathcal{F}_\pm(k) = f_\pm(k, 0). \quad (3.116)$$

Die Wahl  $r = r_0 = 0$  ist für das Verfahren nicht entscheidend. Ebenso kann ein beliebiger Wert  $r_0 \neq 0$  gewählt werden. Allerdings muss sicher gestellt sein, dass die Lösung  $u_{l,0}(k, r)$  für  $r < r_0$  an diesem Punkt noch exakt ist. Zur Berechnung der Streuphase  $\delta_{l=0}(k)$  benötigen wir nicht beide Jost-Lösungen, da  $f_+(k, r)$  und  $f_-(k, r)$  über dem Zusammenhang

$$f_+(k, r) = f_-^*(k^*, r) \quad (3.117)$$

miteinander verknüpft sind.<sup>11</sup> Die Streuphase ergibt sich aus den Jost-Lösungen ausgewertet bei  $r = 0$ :

$$\tan \delta_{l=0}(k) = \frac{\Im(\mathcal{F}_-(k))}{\Re(\mathcal{F}_-(k))} = \frac{\Im(f_-(k, 0))}{\Re(f_-(k, 0))}. \quad (3.118)$$

Für  $l \neq 0$  ist Gleichung (3.116) nicht mehr anwendbar, da die reguläre Lösung für  $r \rightarrow 0$  proportional zu  $r^{l+1}$  und somit nicht nur  $u_{l,0}(k, 0) = 0$  ist, sondern auch die erste Ableitung im Limes  $r \rightarrow 0$  verschwindet,  $u'_{l,0}(k, 0) = 0$ . Hier werden die Jost-Funktionen  $\mathcal{F}_\pm(k)$  durch

$$\mathcal{F}_\pm(k) = (2l + 1) \lim_{r \rightarrow 0} r^l f_\pm(k, r) \quad (3.119)$$

definiert und es kann ein ähnlicher Ausdruck zu (3.118) gefunden werden:

$$\tan \delta_l(k) = \frac{\Im(e^{i\pi l/2} \mathcal{F}_-(k))}{\Re(e^{i\pi l/2} \mathcal{F}_-(k))}. \quad (3.120)$$

Für die inelastische Streuung, wie z.B. die Streuung mit absorbierenden Randbedingungen, sind die Gleichungen (3.118) und (3.120) nicht anwendbar, da die  $S$ -Matrix nicht mehr unitär und die Streuphase auf Grund des Teilchenverlusts komplex ist. In diesem Fall müssen die Wronski-Determinanten in (3.114) bestimmt werden, um die Jost-Funktionen zu erhalten.

<sup>11</sup>Gleichung (3.117) folgt für ein reelles  $k$  und ein reelles Potential direkt aus den Eigenschaften von Differentialgleichungen zweiter Ordnung: für eine komplexe Lösung ist ihr konjugiert komplexes wieder eine linearunabhängige Lösung und mit der Definition (3.107) ergibt sich obige Aussage. Für ein komplexes  $k$  kann (3.117) mit Hilfe des Schwarzen Spiegelungsprinzips bestätigt werden [38].



### 3.4.1.1 Beispiel: Stufenpotential

Ebenso wie in den vorherigen Abschnitten verdeutlichen wir die Theorie der Jost-Funktionen am Beispiel des Stufenpotentials (3.34) (s. hierzu auch [79]). Zur Bestimmung der Jost-Lösungen können wir prinzipiell das im Anhang A beschriebene Verfahren verwenden, in dem wir die Volterra-Gleichung (A.19) lösen; aber für dieses einfache Potential kann die Struktur der Lösung “erraten” werden und wir verzichten auf diesen komplizierten Ansatz und unterteilen zunächst die Jost-Lösung  $f_+(k, r)$  in zwei Bereiche:

$$f_+(k, r) = f_+^{(1)}(k, r)\Theta(L - r) + f_+^{(2)}(k, r)\Theta(r - L) . \quad (3.121)$$

$f_+^{(2)}(k, r)$  lässt sich leicht bestimmen, da das Potential in diesem Bereich Null ist und  $f_+^{(2)}(k, r)$  die Randbedingung (3.107) erfüllen muss:

$$f_+^{(2)}(k, r) = e^{ikr} . \quad (3.122)$$

Die Funktion  $f_+^{(1)}(k, r)$  folgt aus (A.19), die sich in diesem Fall zu

$$f_+^{(1)}(k, r) = e^{ikr} + k_0^2 \int_r^L \frac{\sin(k(r - r'))}{k} f_+^{(1)}(k, r') dr' \quad (3.123)$$

reduziert. Aber anstatt diese Integralgleichung zu lösen, wählen wir für  $f_+^{(1)}(k, r)$  den Ansatz

$$f_+^{(1)}(k, r) = Ae^{iqr} + Be^{-iqr} , \quad (3.124)$$

mit den Unbekannten  $q$ ,  $A$  und  $B$ , die sich durch Einsetzen in (3.123) mit einem Koeffizientenvergleich zu

$$q^2 = k^2 + k_0^2, \quad A = \frac{q + k}{2q} e^{-i(q-k)L} \quad \text{und} \quad B = \frac{q - k}{2q} e^{i(q+k)L} \quad (3.125)$$

berechnen. Insgesamt erhalten wir für die Lösung  $f_+(k, r)$ :

$$f_+(k, r) = \left( \frac{q + k}{2q} e^{-i(q-k)L} e^{iqr} + \frac{q - k}{2q} e^{i(q+k)L} e^{-iqr} \right) \Theta(L - r) + e^{ikr} \Theta(r - L) , \quad (3.126)$$

aus der sich mit Gleichung (3.117)  $f_-(k, r)$  ergibt.

Für die elastische Streuung mit der regulären Lösung

$$u_0(k, r) \propto \sin(qr) \quad \text{für} \quad r < L , \quad (3.127)$$

folgt für die  $S$ -Matrix mit (3.115) und (3.116):

$$S(k) = \frac{(q + k)e^{i(q-k)L} + (q - k)e^{-i(q+k)L}}{(q + k)e^{-i(q-k)L} + (q - k)e^{i(q+k)L}} \quad (3.128)$$

und für die (reelle) Streuphase

$$\delta(k) = -kL + \arctan \left( \frac{k}{q} \tan(qL) \right) . \quad (3.129)$$

Dies entspricht dem Ergebnis aus Gleichung (3.36).

Auf der anderen Seite für absorbierende Randbedingungen in Form von einlaufenden WKB-Wellen,

$$u_0(k, r) \propto e^{-iqr} \quad \text{für } r < L, \quad (3.130)$$

nimmt die  $S$ -Matrix die Gestalt

$$S(k) = \frac{q - k}{q + k} e^{-2ikL} \quad (3.131)$$

an und wir können die (komplexe) Streuphase äquivalent zu Gleichung (3.38) berechnen:

$$\delta(k) = -kL - \frac{i}{2} \ln \left( \frac{q - k}{q + k} \right). \quad (3.132)$$

### 3.4.2 Jost-Funktionen und attraktive, singuläre Potentiale

Während die Theorie der Jost-Funktionen und Jost-Lösungen schon häufig für die Streuung an repulsiven, singulären Potentialen genutzt wurde [27, 28, 87, 90, 91], trifft dies nicht auf attraktive, singuläre Potentiale zu. Die Ursache hierfür liegt darin, dass die eindeutige Definition der Streuphase ohne weitere Voraussetzungen an die Randbedingungen für  $r \rightarrow 0$  nicht möglich ist. Während im repulsiven Fall alle bis auf eine Lösung der Schrödinger-Gleichung divergieren und somit unphysikalisch sind, konvergieren im attraktiven Fall alle Lösungen für  $r \rightarrow 0$  gegen Null. Dies folgt für Potentiale, die schneller abfallen als  $-1/r^2$ , direkt aus den Eigenschaften der WKB-Wellenfunktion und erlaubt es uns nicht eine der Lösungen gegenüber der anderen vorzuziehen. Eine einlaufende und eine auslaufende Lösung kann zu einer reellen Lösung wie in Gleichung (2.22) zusammengefasst werden. Die eindeutige Definition der Streuphase ist nicht möglich. Legen wir dagegen die Randbedingungen durch einlaufende WKB-Wellen fest, ist es möglich, Streuphasen sinnvoll zu definieren und mit Hilfe der Jost-Funktionen (3.114) zu bestimmen.

#### 3.4.2.1 Bestimmung der Jost-Lösungen für homogene, singuläre Potentiale

Zur Herleitung der Jost-Lösungen für homogene, singuläre Potentiale betrachten wir zunächst den Fall der repulsiven Potentiale. Diese wurden aus der ihr assoziierten Schrödinger-Gleichung

$$\frac{d^2}{dr^2} u_l(k, r) + \left( k^2 - \frac{g^2}{r^\alpha} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_l(k, r) = 0, \quad \alpha > 2, \quad g^2 > 0, \quad (3.133)$$

von del Giudice und Galzenati [27, 28] mit Hilfe der Volterra-Gleichung (A.15) und dem Ansatz (A.16) bestimmt und an die reguläre Lösung angepasst, um die (reellen) Streuphasen zu berechnen. Für attraktive, singuläre Potentiale ( $g^2 < 0$  in (3.133)) und einlaufende WKB-Wellen ist dieses Verfahren in modifizierter Weise anwendbar.

Führen wir zunächst die neuen Variablen

$$m = l + 1/2, \quad q = k^{(\alpha-2)/\alpha} g^{2/\alpha} \quad \text{und} \quad z = \left( \frac{k}{g} \right)^{2/\alpha} r, \quad (3.134)$$

ein, so kann Gleichung (3.133) als

$$\left[ \frac{d^2}{dz^2} + q^2 - \frac{q^2}{z^\alpha} - \frac{m^2 - 1/4}{z^2} \right] u_l(q, z) = 0 \quad (3.135)$$

geschrieben werden und die Jost-Lösungen  $f_{\pm}(k, r)$  transformieren sich für  $r \rightarrow +\infty$  zu

$$f_{\pm}(q, z) \stackrel{qz \rightarrow \infty}{\sim} e^{\pm iqz}. \quad (3.136)$$

Die dimensionslose Variable  $z = r/r_0$ ,  $r_0 = (g/k)^{2/\alpha}$  wurde so gewählt, dass die Koeffizienten der kinetischen und potentiellen Energie am Punkt  $r_0$  in Abhängigkeit des Parameters  $q^2$  gleich sind [27],  $(kr_0)^2 = g^2/r_0^{2/\alpha}$ . Dies gewährleistet eine gleiche Ordnung für die Approximationen der iterativen Lösungen, eine beginnend am Ursprung, die andere startend bei unendlich [87].

Eine wichtige Eigenschaft der Variablentransformation (3.134) ist die Relation  $qz = kr$ . Sie bedeutet, dass das Produkt  $qz$  eine reelle Größe ist, unabhängig davon, ob das Potential repulsiv ( $g^2 > 0$ ) oder attraktiv ( $g^2 < 0$ ) ist.

Um eine Entwicklung von  $f_{\pm}(q, z)$  in  $q^2$  zu finden, suchen wir eine geeignete Integraldarstellung der Gleichung (3.135). Hierfür definieren wir die Funktion

$$\phi_l(q, z) = z^{-1/2} u_l(q, z), \quad (3.137)$$

die der Differentialgleichung

$$\left[ \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} + \left( q^2 - \frac{q^2}{z^\alpha} - \frac{m^2}{z^2} \right) \right] \phi_l(q, z) = 0 \quad (3.138)$$

genügt und mit der die Jost-Lösung  $f_-(q, z)$  ausgedrückt werden kann:

$$\phi_l^{(-)}(q, z) \stackrel{qz \rightarrow \infty}{\sim} z^{-1/2} f_-(q, z). \quad (3.139)$$

Die Lösung der Gleichung (3.138) kann mit Hilfe der Integralgleichung (A.15) für  $\phi_l^{(-)}(q, z)$  und der Green's Funktion

$$G(z, z') = \begin{cases} 0 & \text{für } qz' < qz, \\ \frac{H_m^{(2)}(qz)H_m^{(1)}(qz') - H_m^{(2)}(qz')H_m^{(1)}(qz)}{W(H_m^{(1)}(qz'), H_m^{(2)}(qz'))} & \text{für } qz' > qz, \end{cases} \quad (3.140)$$

der homogenen Differentialgleichung

$$\left( \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} + \left( q^2 - \frac{m^2}{z^2} \right) \right) \phi_l(q, z) = 0 \quad (3.141)$$

bestimmt werden:

$$\phi_l^{(-)}(q, z) = \phi_{l,0}^{(-)}(q, z) - \frac{1}{q} \int_{qz}^{\infty} G(z, z') V(z') \phi_l^{(-)}(q, z') d(qz'). \quad (3.142)$$

$\phi_{l,0}^{(-)}(q, z)$  ist die Lösung von (3.141), welche die Randbedingung (3.139) erfüllt und durch die Hankel-Funktionen  $H_n^{(1,2)}$  beschrieben werden kann:

$$\phi_{l,0}^{(-)}(q, z) = \left( \frac{1}{2} \pi q \right)^{1/2} \exp \left( -\frac{1}{2} i \left( m + \frac{1}{2} \right) \pi \right) H_m^{(2)}(qz). \quad (3.143)$$

Die Volterra-Gleichung (3.142) lässt sich iterativ mit dem Ansatz (A.16) lösen,

$$\phi_l^{(-)}(q, z) = \sum_i \phi_{l,i}^{(-)}(q, z), \quad (3.144)$$

wobei  $\phi_{l,0}^{(-)}(q, z)$  in Gleichung (3.143) und  $\phi_{l,i}^{(-)}(q, z)$  durch

$$\phi_{l,i}^{(-)}(q, z) = -\frac{1}{q} \int_{qz}^{\infty} G(z, z') V(z') \phi_{l,i-1}^{(-)}(q, z') d(qz') \quad (3.145)$$

definiert ist.<sup>12</sup>

Die erste iterative Lösung  $\phi_{l,1}^{(-)}$  kann analytisch mit Hilfe der Zerlegung der Hankel-Funktionen aus (3.140) in Bessel-Funktionen

$$H_{\nu}^{(1)}(z) = \frac{i}{\sin(\pi\nu)} (e^{-i\pi\nu} J_{\nu}(z) - J_{-\nu}(z)) , \quad H_{\nu}^{(2)}(z) = \frac{i}{\sin(\pi\nu)} (J_{\nu}(z) - e^{i\pi\nu} J_{-\nu}(z)) \quad (3.146)$$

auf das Integral (3.82) zurückgeführt werden und wir erhalten mit den Abkürzungen  $\eta = 2\nu$  und

$$A_{\pm m}(q, z) = \exp\left(\mp \frac{1}{2} m \pi i\right) \int_{qz}^{\infty} \frac{J_{\mp m}^2(t)}{t^{2/\eta+1}} dt - \exp\left(\pm \frac{1}{2} m \pi i\right) \int_{qz}^{\infty} \frac{J_m(t) J_{-m}(t)}{t^{2/\eta+1}} dt \quad (3.147)$$

für  $\phi_{l,1}^{(-)}(q, z)$

$$\phi_{l,1}^{(-)}(q, z) = \left(\frac{1}{2}\pi\right)^{3/2} \frac{\exp\left(-\frac{3}{4}i\pi\right)}{\sin^2(m\pi)} q^{5/2+2/\eta} (A_{-m}(q, z) J_{-m}(qz) + A_{+m}(q, z) J_m(qz)) . \quad (3.148)$$

Die Integrale ausgewertet an den Grenzen liefern für  $A_{-m}(q, z)$

$$\begin{aligned} A_{-m}(q, z) &= -\frac{\sin(m\pi)}{2\pi^{3/2}} \exp\left(i\frac{\pi}{\eta}\right) \exp\left(-\frac{1}{2}im\pi\right) \frac{\Gamma(-1/\eta)\Gamma(m-1/\eta)\Gamma(1/\eta+1/2)}{\Gamma(1/\eta+m+1)} - \\ &- \frac{\exp\left(\frac{1}{2}im\pi\right)}{\Gamma^2(m+1)(m-1/\eta)} \left(\frac{qz}{2}\right)^{2m+1} (qz)^{-2/\eta-1} \times \\ &\times {}_2F_3\left(\begin{matrix} m+1/2, m-1/\eta \\ m+1, 2m+1, m-1/\eta+1 \end{matrix} \middle| -(qz)^2\right) - \\ &- \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}im\pi\right)}{\Gamma(m+1)\Gamma(-m+1)} \eta \left(\frac{qz}{2}\right) (qz)^{-2/\eta-1} \times \\ &\times {}_2F_3\left(\begin{matrix} 1/2, -1/\eta \\ -m+1, m+1, 1-1/\eta \end{matrix} \middle| -(qz)^2\right) , \end{aligned} \quad (3.149)$$

wobei  $A_{+m}(q, z)$  aus der Substitution von  $m$  durch  $-m$  in der letzten Gleichung folgt. Entwickeln wir in Gleichung (3.148) das Produkt  $A_{\pm m} J_{\pm m}$  mit Hilfe der Relation

$${}_2F_3\left(\begin{matrix} a_1, a_2 \\ b_1, b_2, b_3 \end{matrix} \middle| -(qz)^2\right) = 1 + \mathcal{O}((qz)^2) \quad (3.150)$$

<sup>12</sup>Wie in [27] gezeigt, handelt es sich bei der Summe (3.144) tatsächlich um eine Reihenentwicklung in  $q^2$ .

und vernachlässigen alle Terme der Ordnung  $\mathcal{O}((qz)^2)$ , führt dies zu dem gesuchten Ausdruck für  $\phi_{l,1}^{(-)}(q, z)$ :

$$\begin{aligned} \phi_{l,1}^{(-)}(q, z) &= -\frac{1}{4} \frac{\exp\left(-\frac{3}{4}i\pi\right)}{\sqrt{2\pi}} q^{5/2} \left\{ \exp\left(-\frac{1}{2}im\pi\right) \Gamma(m) \left(\frac{z}{2}\right)^{-m} \left[ \frac{\eta^2}{1+\eta m} z^{-2/\eta} f^{-m} + \right. \right. \\ &+ \frac{\Gamma(-1/\eta)\Gamma(m-1/\eta)\Gamma(1/\eta+1/2)}{\sqrt{\pi}\Gamma(1/\eta+m+1)} \exp\left(i\frac{\pi}{\eta}\right) q^{-m+2/\eta} + \mathcal{O}(q^{-m+2}) \left. \right] + \\ &+ \exp\left(\frac{1}{2}im\pi\right) \Gamma(-m) \left(\frac{z}{2}\right)^m \left[ \frac{\eta^2}{1-\eta m} z^{-2/\eta} q^m + \right. \\ &+ \left. \left. \frac{\Gamma(-1/\eta)\Gamma(-m-1/\eta)\Gamma(1/\eta+1/2)}{\sqrt{\pi}\Gamma(1/\eta-m+1)} \exp\left(i\frac{\pi}{\eta}\right) q^{m+2/\eta} + \mathcal{O}(q^{m+2}) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.151)$$

Mit der entsprechenden Entwicklung von  $\phi_{l,0}^{(-)}(q, z)$  erhalten wir insgesamt für  $\phi_l^{(-)}(q, z)$  bis zur ersten Ordnung:

$$\begin{aligned} \phi_l^{(-)}(q, z) &\approx \phi_{l,0}^{(-)}(q, z) + \phi_{l,1}^{(-)}(q, z) = \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{3}{4}i\pi\right) q^{1/2} \left\{ \exp\left(-\frac{1}{2}im\pi\right) \Gamma(m) \left(\frac{z}{2}\right)^{-m} \left[ q^{-m} + \right. \right. \\ &+ \frac{1}{4} \left( \frac{\eta^2}{1+\eta m} z^{-2/\eta} - \frac{1}{1-m} z^2 \right) q^{-m+2} + \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(-1/\eta)\Gamma(m-1/\eta)\Gamma(1/\eta+1/2)}{\Gamma(1/\eta+m+1)} \times \\ &\times \exp\left(i\frac{\pi}{\eta}\right) q^{-m+2/\eta+2} + \dots \left. \right] + \\ &+ \exp\left(\frac{1}{2}im\pi\right) \Gamma(-m) \left(\frac{z}{2}\right)^m \left[ q^m + \frac{1}{4} \left( \frac{\eta^2}{1-\eta m} z^{-2/\eta} - \frac{1}{1+m} z^2 \right) q^{m+2} + \right. \\ &+ \left. \left. \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(-1/\eta)\Gamma(-m-1/\eta)\Gamma(1/\eta+1/2)}{\Gamma(1/\eta-m+1)} \exp\left(i\frac{\pi}{\eta}\right) q^{m+2/\eta+2} + \dots \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.152)$$

Abschließend können wir aus (3.139) und (3.117) die Jost-Lösungen  $f_{\pm}(q, z)$  bestimmen:

$$f_{-}(q, z) = z^{1/2} \phi_l^{(-)}(q, z), \quad f_{-}(q, z) = f_{+}^{*}(q^{*}, z). \quad (3.153)$$

### 3.4.2.2 Die Wahl der Randbedingungen

Nachdem wir einen Ausdruck für die Jost-Lösungen gefunden haben, müssen die Randbedingungen für  $r \rightarrow 0$  festgelegt werden. In unserem Fall wählen wir die einlaufenden WKB-Wellen (2.34b), die wir mit den neuen Variablen aus Gleichung (3.134) als

$$u_l(q, z) \stackrel{qz \rightarrow 0}{\sim} z^{1/2} z^{1/(2\eta)} e^{-\eta q z^{-1/\eta}} \stackrel{\text{Def.}}{=} u_l^{\text{WKB}}(q, z) = z^{1/2} \phi_l^{\text{WKB}}(q, z) \quad (3.154)$$

schreiben können [92]. Dieser Ausdruck unterscheidet sich von der regulären Lösung in [27] nur durch die Tatsache, dass das Produkt  $qz^{-1/\eta}$  komplex ist. Im regulären Fall ist das Produkt reell, so dass  $u_l(q, z)$  für  $r \rightarrow 0$  die geforderte abfallende Funktion beschreibt.

Für die Berechnung der Streuphase fehlt noch die Entwicklung von  $u_l^{\text{WKB}}(q, z)$ , die prinzipiell mit dem gleichen Verfahren wie im vorherigen Abschnitt bestimmt werden kann. Allerdings erfüllt Gleichung (3.138) folgende Symmetrierelation: für eine Lösung  $\phi_l^{(-)}(m, \eta; q, z)$  ist  $\phi_l^{(-)}(\eta m, 1/\eta; \exp(-i\pi/2)\eta q, z^{-1/\eta})$  wieder eine Lösung, die im Limes  $qz \rightarrow 0$  mit  $\phi_l^{\text{WKB}}(q, z)$  in (3.154) übereinstimmt:

$$\phi_l^{(-)}(\eta m, 1/\eta; \exp(-i\pi/2)\eta q, z^{-1/\eta}) \stackrel{qz \rightarrow 0}{\sim} (z^{-1/\eta})^{-1/2} \exp(-\eta q z^{-1/\eta}). \quad (3.155)$$

Diese Relation bedeutet, dass die Volterra-Gleichung (3.142) für  $\phi_l^{\text{WKB}}(q, z)$  nicht erneut gelöst werden muss, sondern dass diese Transformation aus den Jost-Lösungen (3.152) die gesuchte Entwicklung für  $\phi_l^{\text{WKB}}(q, z)$  liefert. Weiter vereinfacht sich das Problem, wenn wir beachten, dass zur Bestimmung der Jost-Funktionen  $\mathcal{F}_\pm(k)$  nicht alle Beiträge in der Wronski-Determinante (3.114) berücksichtigt werden müssen, sondern nur Terme proportional zu  $z^{l+1}$  und  $z^{-l}$  [27, 28].<sup>13</sup>

### 3.4.2.3 Der Fall $l = 0$

Beginnen wir zunächst mit dem einfachen Fall  $l = 0$ , was  $m = 1/2$  entspricht. Die Approximation der Jost-Lösung und der WKB-Lösung folgt aus (3.152) und (3.153):

$$\begin{aligned} f_-(q, z) &= 1 - izq - \left[ \frac{1}{2}z^2 - \frac{1}{(\alpha-1)(\alpha-2)}z^{2-\alpha} \right] q^2 + \\ &+ i \left[ \frac{z^3}{6} - \frac{1}{(\alpha-2)(\alpha-3)}z^{3-\alpha} \right] q^3 + 2^{\alpha-2}\Gamma(1-\alpha) \exp\left(i\alpha\frac{\pi}{2}\right) q^\alpha + \\ &+ i2^{\alpha-2}\Gamma(1-\alpha) \exp\left(i\alpha\frac{\pi}{2}\right) zq^{\alpha+1} + \dots, \end{aligned} \quad (3.156)$$

und

$$\begin{aligned} u_0^{\text{WKB}}(q, z) &= \frac{\Gamma(1/(\alpha-2))}{\sqrt{\pi}(\alpha-2)^{1/2-1/(\alpha-2)}} zq^{1/2-1/(\alpha-2)} + \frac{\Gamma(-1/(\alpha-2))}{\sqrt{\pi}(\alpha-2)^{1/2+1/(\alpha-2)}} q^{1/2+1/(\alpha-2)} + \\ &+ \frac{\Gamma(1/(\alpha-2))}{\sqrt{\pi}(\alpha-2)^{3/2-1/(\alpha-2)}} \left[ \frac{1}{\alpha-3}z^{3-\alpha} - \frac{\alpha-2}{6}z^3 \right] q^{5/2-1/(\alpha-2)} + \\ &+ \frac{\Gamma(-1/(\alpha-2))}{\sqrt{\pi}(\alpha-2)^{3/2+1/(\alpha-2)}} \left[ \frac{1}{\alpha-1}z^{2-\alpha} - \frac{\alpha-2}{2}z^2 \right] q^{5/2+1/(\alpha-2)} + \\ &+ \frac{1}{3} \frac{2^{4/(\alpha-2)}}{(\alpha-2)^{1/2+3/(\alpha-2)}} \frac{\Gamma(-2/(\alpha-2))\Gamma(2/(\alpha-2)+1/2)}{\Gamma(3/(\alpha-2))\sin(\pi/(\alpha-2))} zq^{5/2+3/(\alpha-2)} + \\ &+ \frac{2^{4/(\alpha-2)}}{(\alpha-2)^{1/2+5/(\alpha-2)}} \frac{\Gamma(-2/(\alpha-2))\Gamma(-3/(\alpha-2))\Gamma(2/(\alpha-2)+1/2)}{\Gamma^2(1/(\alpha-2))\sin(\pi/(\alpha-2))} \times \\ &\times q^{5/2+5/(\alpha-2)} + \dots, \end{aligned} \quad (3.157)$$

wobei  $q$  und  $k$  über die Relation (3.134) zusammen hängen. Für  $g^2 < 0$  ist  $q$  eine komplexe Größe, die ausgedrückt durch die Wellenzahl  $k$  und die Längenskala  $\beta_\alpha$  (2.30) die Gestalt ( $g^2 = -\beta_\alpha^{\alpha-2}$ )

$$q = (k\beta_\alpha)^{(\alpha-2)/\alpha} e^{-i\pi/\alpha} \quad (3.158)$$

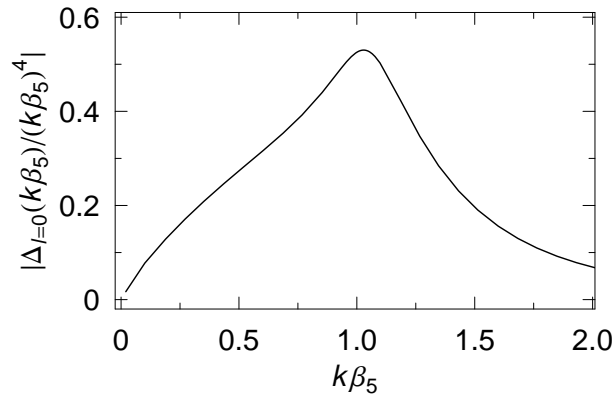
annimmt. Der Faktor  $e^{-i\pi/\alpha}$  stammt aus der Transformation vom repulsiven auf das attraktive Potential,

$$g^2 \rightarrow -g^2, \quad \beta_\alpha \rightarrow e^{-i\pi\nu}\beta_\alpha, \quad \nu = \frac{1}{\alpha-2}. \quad (3.159)$$

Auch wenn die Entwicklungen (3.156) und (3.157) für beliebige  $\alpha > 2$  gültig sind, reduzieren wir unsere Betrachtungen auf den Fall ganzzahliger Werte von  $\alpha$ . Für  $\alpha > 5$  folgt aus (3.115):

$$\begin{aligned} \tan \delta_{l=0}(k) &\stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{\Gamma(-\nu)}{\Gamma(\nu)} \nu^{2\nu} e^{-i\pi\nu} (k\beta_\alpha) + \frac{\Gamma(-\nu)\Gamma^2(-2\nu)\Gamma(-3\nu)}{\Gamma^2(\nu)\Gamma(-4\nu)} \times \\ &\times \nu^{1+6\nu} e^{-3i\pi\nu} (k\beta_\alpha)^3 - \frac{\sqrt{\pi}\Gamma(-1/2-1/(2\nu))}{4\Gamma(1/(2\nu)+1)} (k\beta_\alpha)^{\alpha-2} + \mathcal{O}(k^5). \end{aligned} \quad (3.160)$$

<sup>13</sup>Für  $l \neq -1/2$  stellt diese Einschränkung eine deutliche Vereinfachung dar. Hingegen tritt für  $l = -1/2$  das Problem auf, dass die zwei Lösungen  $z^{l+1}$  und  $z^{-l}$  linear abhängig sind und die Wronski-Determinante identisch Null ist. Im Fall der  $s$ -Wellenstreuung in zwei Dimensionen ist dieses Verfahren nicht anwendbar.



**Abbildung 3.10:** Differenz (3.164) zwischen der numerisch berechneten Streuphase und der analytischen Lösung (3.163) für  $\alpha = 5$  und  $l = 0$  als Funktion des dimensionslosen Parameters  $k\beta_5$ . Im Limes  $k \rightarrow 0$  strebt  $|\Delta_{l=0}(k\beta_5)/(k\beta_5)^4|$  gegen Null, so dass alle Beiträge bis zur und inklusive der Ordnung  $\mathcal{O}(k^4)$  richtig sind.

Eine Entwicklung dieser Gleichung bestätigt die effektive Reichweite  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}$  aus (3.89). Für den physikalisch relevanten Fall  $\alpha = 6$  kann noch ein zusätzlicher Term der Ordnung  $\mathcal{O}(k^4)$  gegenüber der effective-range Theorie angegeben werden. Dies ist von Bedeutung, da  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}$  für  $\alpha = 6$  Null ist (vgl. Tabelle 3.2).

Für die *kritischen* Werte  $\alpha_{\text{crit}} = 3, 4, 5$  treten in den Gleichungen (3.156) und (3.157) Gamma-Funktionen mit negativen ganzzahligen Argumenten auf, deren Grenzwerte  $\alpha \rightarrow \alpha_{\text{crit}}$  aber in (3.115) existieren und wir erhalten:

$$\begin{aligned} \tan \delta_{l=0}(k) &\stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -(k\beta_3) \ln(k\beta_3) - \left( \ln 2 + 3\gamma - \frac{3}{2} - i\pi \right) (k\beta_3) + \\ &+ \mathcal{O}((k\beta_3)^2) \quad \text{für } \alpha = 3, \end{aligned} \quad (3.161)$$

$$\begin{aligned} \tan \delta_{l=0}(k) &\stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} i(k\beta_4) - \frac{\pi}{3}(k\beta_4)^2 + \frac{4}{3}i(k\beta_4)^3 \ln(k\beta_4) \\ &+ \frac{2\pi}{3}(k\beta_4)^3 + \left( \frac{8}{3}(\gamma + \ln 2) - \frac{28}{9} \right) i(k\beta_4)^3 + \mathcal{O}((k\beta_4)^4) \quad \text{für } \alpha = 4, \end{aligned} \quad (3.162)$$

$$\begin{aligned} \tan \delta_{l=0}(k) &\stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} - \left( \frac{1}{3} \right)^{2/3} \frac{\Gamma(2/3)}{\Gamma(4/3)} (k\beta_5) e^{-i\pi/3} + \frac{1}{3}(k\beta_5)^3 \ln(k\beta_5) \\ &- \left( \frac{13}{36} + \frac{\ln 3}{18} - \frac{\ln 2}{3} - \frac{5}{9}\gamma - \frac{\pi}{6\sqrt{3}} + i\frac{\pi}{9} \right) (k\beta_5)^3 + \\ &+ 3^{-7/6} \frac{2\pi^2}{\Gamma^2(1/3)} e^{-4/3i\pi} (k\beta_5)^4 + \mathcal{O}((k\beta_5)^5) \quad \text{für } \alpha = 5. \end{aligned} \quad (3.163)$$

Diese Ergebnisse komplettieren die Resultate aus Abschnitt 3.3.2 für  $\alpha < 6$  und können durch numerisches Lösen der Schrödinger-Gleichung (3.133) geprüft werden, indem wir z.B. für  $\alpha = 5$  die Differenz aus  $\Delta_{l=0}(k\beta_5)$  der numerischen Lösung  $\delta_{\text{num}}(k\beta_5)$  und der analytischen Lösung  $\delta_{\text{ana}}(k\beta_5)$  betrachten (vgl. Abbildung 3.10):

$$\Delta_{l=0}(k\beta_5) = \delta_{\text{num}}(k\beta_5) - \delta_{\text{ana}}(k\beta_5). \quad (3.164)$$

### 3.4.2.4 Der Fall $l \neq 0$

Für  $l \neq 0$  beschränken wir unsere Ergebnisse wieder auf ganzzahlige  $\alpha$ . Die Ausdrücke für  $f_-$  und  $u_l^{\text{WKB}}$  können auf ähnliche Weise wie für  $l = 0$  gefunden werden:

$$\begin{aligned}
f_-(q, z) = & -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{3}{4}i\pi\right) q^{1/2} \left\{ \exp\left(-\frac{1}{2}im\pi\right) \Gamma(m) 2^m z^{-m+1/2} \times \right. \\
& \times \left[ q^{-m} + \frac{1}{4} \left( \frac{\eta^2}{1+\eta m} z^{-2/\eta} - \frac{1}{1-m} z^2 \right) q^{-m+2} + \right. \\
& + \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(-1/\eta)\Gamma(m-1/\eta)\Gamma(1/\eta+1/2)}{\Gamma(1/\eta+m+1)} \exp\left(i\frac{\pi}{\eta}\right) q^{-m+2/\eta+2} + \dots \left. \right] + \\
& + \exp\left(\frac{1}{2}im\pi\right) \Gamma(-m) 2^{-m} z^{m+1/2} \left[ q^m + \frac{1}{4} \left( \frac{\eta^2}{1-\eta m} z^{-2/\eta} - \frac{1}{1+m} z^2 \right) q^{m+2} + \right. \\
& + \left. \left. \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(-1/\eta)\Gamma(-m-1/\eta)\Gamma(1/\eta+1/2)}{\Gamma(1/\eta-m+1)} \exp\left(i\frac{\pi}{\eta}\right) q^{m+2/\eta+2} + \dots \right] \right\} \quad (3.165)
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
u_l^{\text{WKB}}(q, z) = & \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (\eta q)^{1/2} \left\{ \Gamma(\eta m) 2^{\eta m} z^{m+1/2} \times \right. \\
& \times \left[ (\eta q)^{-\eta m} - \frac{1}{4} \left( \frac{1}{\eta^2(m+1)} z^2 - \frac{1}{1-\eta m} z^{-2/\eta} \right) (\eta q)^{-\eta m+2} - \right. \\
& - \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(-\eta)\Gamma(\eta m - \eta)\Gamma(\eta+1/2)}{\Gamma(\eta+\eta m+1)} (\eta q)^{-\eta m+2\eta+2} + \dots \left. \right] + \\
& + \Gamma(-\eta m) 2^{-\eta m} z^{-m+1/2} \times \\
& \times \left[ (\eta q)^{\eta m} - \frac{1}{4} \left( \frac{1}{\eta^2(1-m)} z^2 - \frac{1}{\eta m+1} z^{-2/\eta} \right) (\eta q)^{\eta m+2} - \right. \\
& - \left. \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(-\eta)\Gamma(-\eta m - \eta)\Gamma(\eta+1/2)}{\Gamma(\eta-\eta m+1)} (\eta q)^{\eta m+2+2\eta} + \dots \right] \left. \right\}. \quad (3.166)
\end{aligned}$$

Wie für  $l = 0$  müssen wir zwischen nichtkritischen und den zwei kritischen Fällen  $\alpha_{\text{crit}} = 2l+3$  und  $\alpha_{\text{crit}} = 2l+5$  unterscheiden, bei denen wieder negative Argumente in den Gamma-Funktionen auftreten. Für die nichtkritischen Fälle folgt:

$$\begin{aligned}
\tan \delta_l(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} & \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(l-1/(2\nu)+1/2)\Gamma(1/(2\nu)+1/2)}{4 \Gamma(l+1/(2\nu)+3/2)\Gamma(1/(2\nu)+1)} (k\beta_\alpha)^{\alpha-2} - (-1)^l \nu^{2\nu(2l+1)} \times \\
& \times \frac{\Gamma(-l-1/2)\Gamma(-(2l+1)\nu)}{2^{2l+1}\Gamma(l+1/2)\Gamma((2l+1)\nu)} (k\beta_\alpha)^{2l+1} e^{-i\pi(2l+1)\nu} - \\
& - (-1)^l \frac{\sqrt{\pi}\Gamma(-l-1/2)}{2^{2l}\Gamma(l+1/2)} \nu^{2\nu(2l+3)+1} \frac{2^{4\nu}}{2l+1} \frac{\Gamma(-2\nu)}{\Gamma(-2\nu+1/2)} \times \\
& \times \frac{\Gamma(-(2l+3)\nu)\Gamma((2l-1)\nu)}{\Gamma^2((2l+1)\nu)} (k\beta_\alpha)^{2l+3} e^{-i\pi(2l+3)\nu} + \mathcal{O}((k\beta_\alpha)^\rho), \quad (3.167)
\end{aligned}$$

wobei  $\rho$  eine von  $\alpha$  und  $l$  abhängige ganz Zahl ist:  $\rho = 2(\alpha-2)$  für  $l=1, \alpha < 9/2+l$ ;  $\rho = 2l+5$  für  $l=1, \alpha > 9/2+l$ ;  $\rho = 2(\alpha-2)$  für  $l=2, 3, \dots, \alpha < 6$ ;  $\rho = \alpha+2$  für  $l=2, 3, \dots, 6 < \alpha < 2l+3$  und  $\rho = 2l+5$  für  $l=2, 3, \dots$  und  $\alpha > 2l+3$ .



In den kritischen Fällen  $\alpha_{\text{crit}}$  müssen wir wieder den Limes  $\alpha \rightarrow \alpha_{\text{crit}}$  in (3.115) bilden. Für  $\alpha_{\text{crit}} = 2l + 3$  führt dies zu:

$$\begin{aligned} \tan \delta_l(k) &\stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -\frac{\pi}{2^{2l+2}} \frac{1}{\Gamma^2((2l+3)/2)} (k\beta_{2l+3})^{2l+1} \ln(k\beta_{2l+3}) - \frac{\pi}{2^{2l+2}} \frac{1}{\Gamma^2((2l+3)/2)} \times \\ &\times \left( -\frac{i\pi}{2l+1} - \ln 2 - \frac{2}{2l+1} \ln(2l+1) + \frac{1}{2} \Psi(2l+2) - \Psi\left(\frac{2l+3}{2}\right) + \right. \\ &+ \left. \left(\frac{1}{2} + \frac{2}{2l+1}\right) \gamma \right) (k\beta_{2l+3})^{2l+1} - (-1)^l \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(-l-1/2)}{2^{2l} \Gamma(l+1/2)} (2l+1)^{-4(2l+2)/(2l+1)} \times \\ &\times 2^{4/(2l+1)} \frac{\Gamma(-2/(2l+1))}{\Gamma(-2/(2l+1)+1/2)} \Gamma\left(-\frac{2l+3}{2l+1}\right) \Gamma\left(\frac{2l-1}{2l+1}\right) \times \\ &\times (k\beta_{2l+3})^{2l+3} e^{-i\pi(2l+3)/(2l+1)} + \mathcal{O}((k\beta_\alpha)^\rho), \end{aligned} \quad (3.168)$$

mit  $\rho = 2(2l+1)$  für  $l=1$  und  $\rho = 2l+5$  für  $l=2, 3, 4, \dots$ .

Für  $\alpha_{\text{crit}} = 2l + 5$  folgt für die Streuphase:

$$\begin{aligned} \tan \delta_l(k) &\stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -(-1)^l (2l+3)^{-2(2l+1)/(2l+3)} \frac{\Gamma(-l-1/2)}{2^{2l+1} \Gamma(l+1/2)} \frac{\Gamma(-(2l+1)/(2l+3))}{\Gamma((2l+1)/(2l+3))} \times \\ &\times (k\beta_{2l+5})^{2l+1} e^{-i\pi(2l+1)/(2l+3)} - \frac{1}{((2l+3)!!)^2} \left( (2l+3) \ln 2 + 2 \ln(2l+3) - \right. \\ &- \frac{2l+3}{2} \Psi(2l+3) + (2l+3) \Psi\left(\frac{2l+3}{2}\right) + 2 \Psi\left(-\frac{2}{2l+3}\right) - \Psi\left(-\frac{4}{2l+3}\right) + \\ &+ \left. \frac{2l+5}{2} \Psi(1) + i\pi - \frac{2l-1}{4} \right) (k\beta_{2l+5})^{2l+3} + \\ &+ \frac{2l+3}{((2l+3)!!)^2} (k\beta_{2l+5})^{2l+3} \ln(k\beta_{2l+5}) + \mathcal{O}((k\beta_{2l+5})^{2l+5}), \end{aligned} \quad (3.169)$$

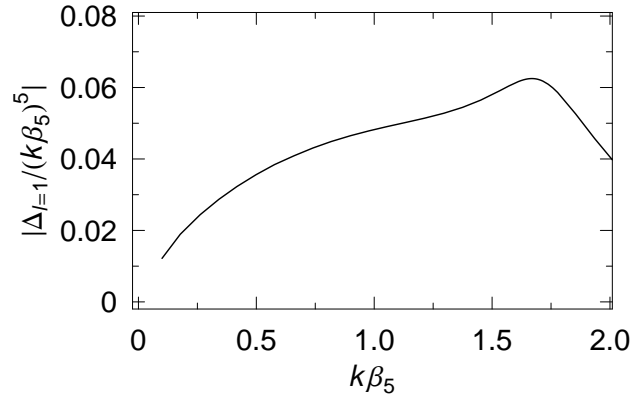
wobei  $\Psi$  für die logarithmische Ableitung der Gamma-Funktion steht, und  $\gamma_E = 0.577215\dots$  ist die Euler-Konstante.

Die numerische Überprüfung folgt analog zu  $l=0$ . Abbildung 3.11 zeigt die Differenz

$$\Delta_{l=1}(k\beta_5) = \delta_{\text{num}}(k\beta_5) - \delta_{\text{ana}}(k\beta_5) \quad (3.170)$$

für  $\alpha = 5$  und  $l = 1$ . In diesem Fall wurde  $\Delta_{l=1}(k\beta_5)$  durch  $(k\beta_5)^5$  geteilt.

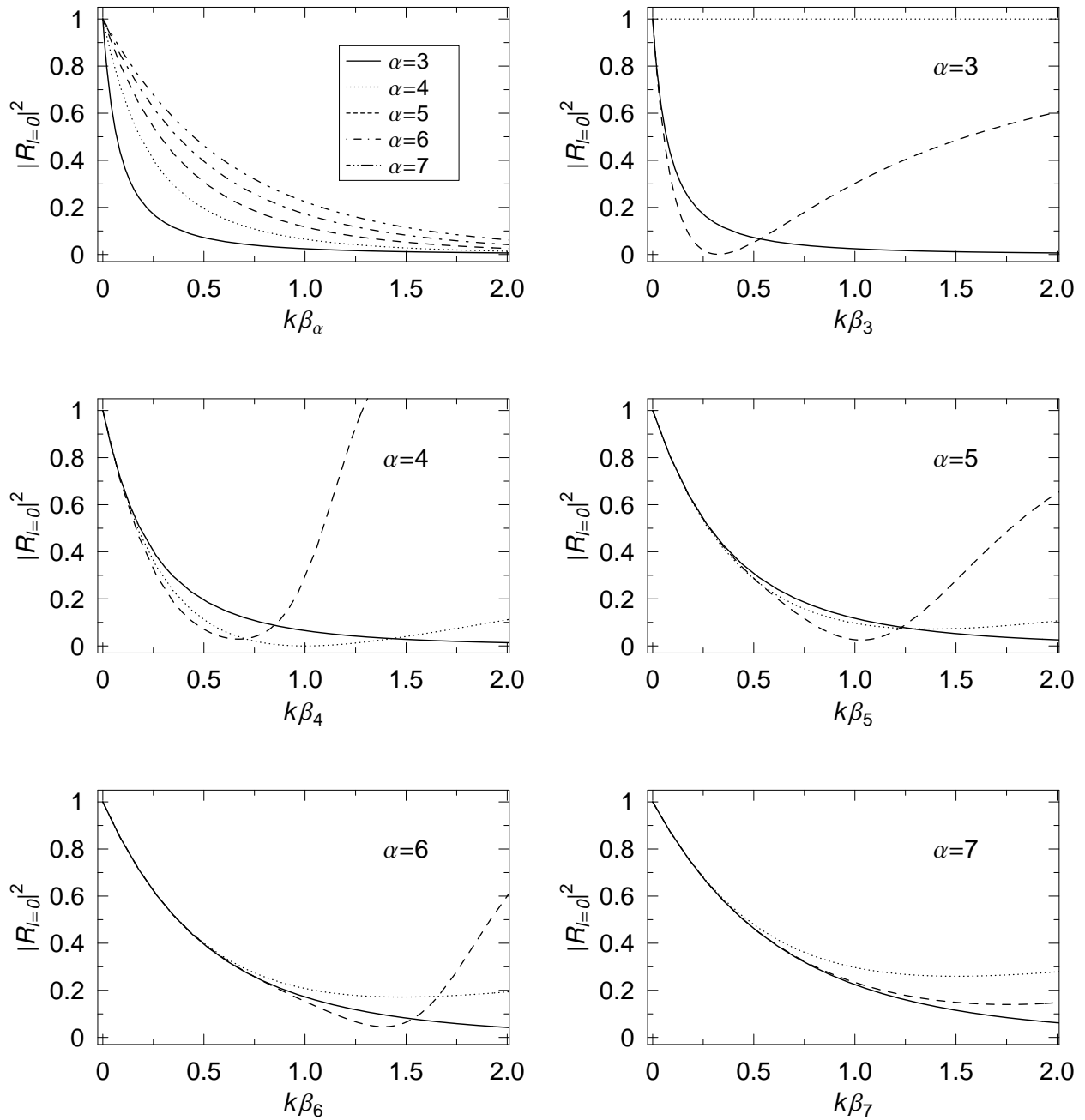
Abbildung 3.12 veranschaulicht die Wahrscheinlichkeit  $|R_{l=0}(k)|^2$  für Quantenreflexion an den attraktiven Potentialen proportional zu  $-1/r^\alpha$  für  $l=0$  und  $\alpha = 3$  bis  $\alpha = 7$  (linkes oberes Bild). In den restlichen Bildern, jedes für ein bestimmtes  $\alpha$ , zeigen die durchgezogenen Linien die numerischen Ergebnisse, die gepunkteten Linien jeweils das Ergebnis, wenn in den Entwicklungen (3.160) bis (3.163) nur der führende Beitrag (proportional zu  $k \ln k$  für  $\alpha = 3$  und proportional zu  $k$  für  $\alpha = 4$  bis  $\alpha = 7$ ) berücksichtigt wird und die gestrichelten Linien das Ergebnis, wenn in Gleichung (3.110) jeweils alle Terme aus den Entwicklungen (3.160) bis (3.163) einbezogen werden. Der führende Term reproduziert die numerischen Ergebnisse für höhere  $\alpha$  zunehmend genauer und gibt diese für  $\alpha > 4$  bis  $k\beta_\alpha \approx 0.5$  gut wieder. Während sich für  $\alpha = 4$  und  $\alpha = 5$  durch die Mitnahme von Termen höherer Ordnung die Übereinstimmung verschlechtert, erkennen wir für  $\alpha = 3, 6$  und  $\alpha = 7$  eine deutliche Verbesserung. Das Argument  $\arg R_{l=0}(k)$  ist in Abbildung 3.13 wieder für  $l=0$  und  $\alpha = 3$  bis  $\alpha = 7$  dargestellt. Im Gegensatz zu den Reflexionswahrscheinlichkeiten werden für  $\alpha \geq 6$



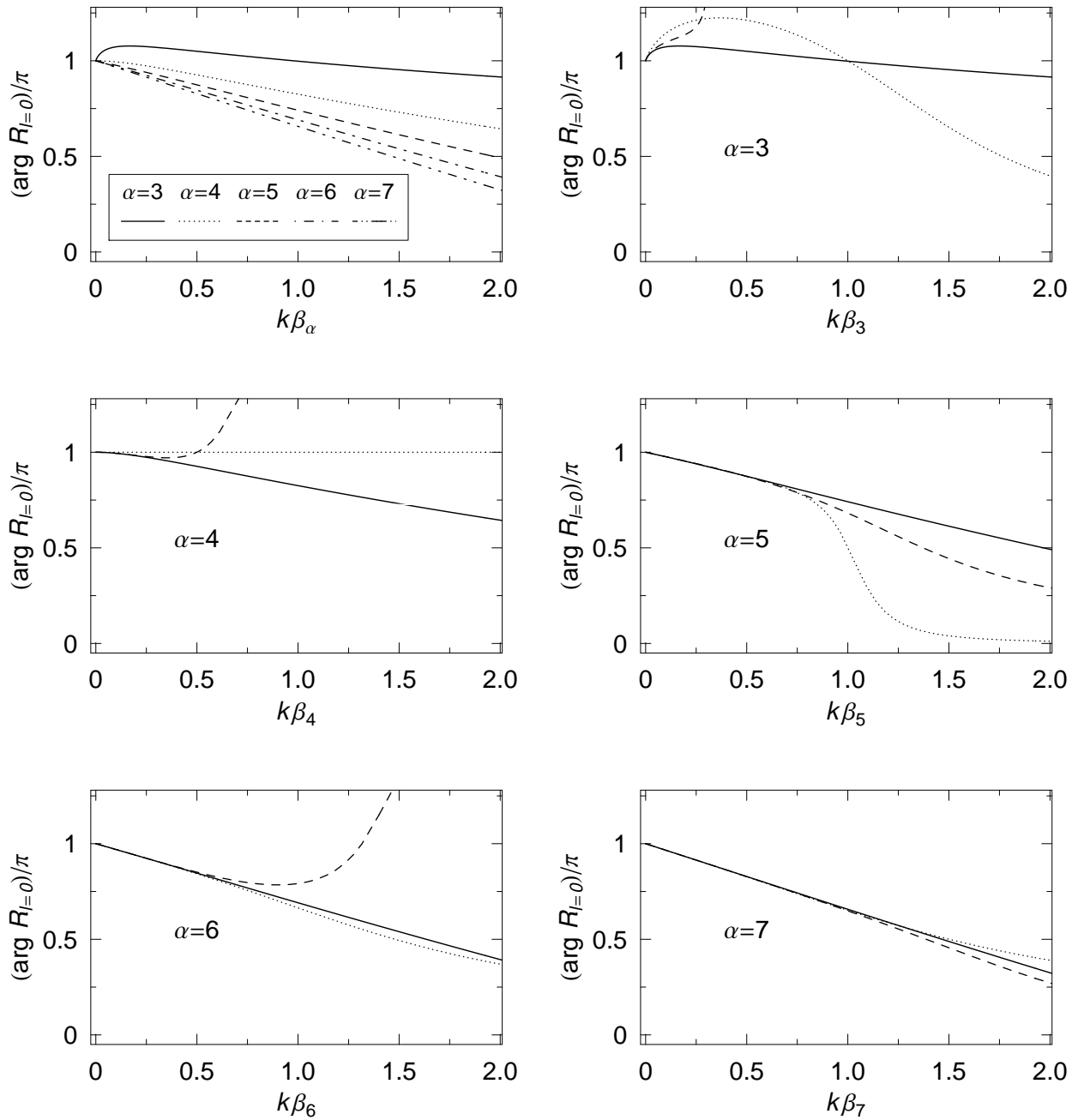
**Abbildung 3.11:** Differenz (3.170) zwischen der numerisch berechneten Streuphase und der analytischen Lösung (3.168) für  $\alpha = 5$  und  $l = 1$  als Funktion des dimensionslosen Parameters  $k\beta_5$ . Im Limes  $k \rightarrow 0$  strebt  $|\Delta_{l=1}(k\beta_5)/(k\beta_5)^5|$  gegen Null, so dass alle Beiträge bis einschließlich der Ordnung  $\mathcal{O}(k^5)$  richtig sind.

die numerischen Ergebnisse (durchgezogene Linien) durch den führenden Term (gepunktete Linien) der Entwicklung (3.160) besser wiedergegeben als durch die gesamte Entwicklung. Der Wertebereich von  $k\beta_\alpha$  für eine gute Näherung durch den führenden Term nimmt jedoch zu (von  $k\beta_3 \approx 0.05$  für  $\alpha = 3$  bis  $k\beta_7 \approx 1.5$ ).

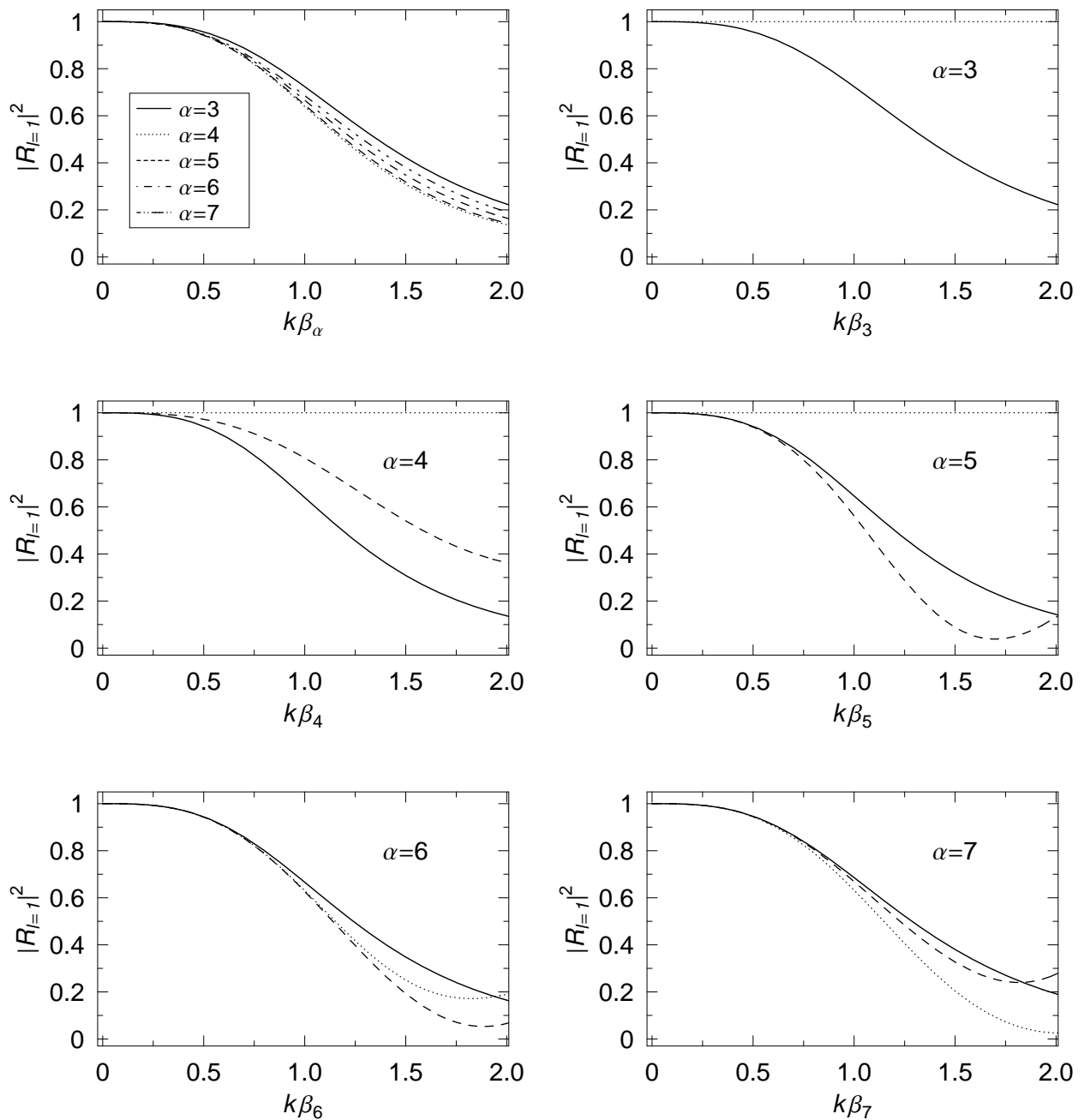
In den Abbildungen 3.14 und 3.15 werden – wie in den zwei Abbildungen vorher – die numerischen Ergebnisse (durchgezogene Linien) mit dem führenden Term (proportional zu  $k^{\alpha-2}$  für  $\alpha = 3, 4$ , proportional zu  $k^3 \ln k$  für  $\alpha = 5$  und proportional zu  $k^3$  für  $\alpha = 6, 7$ ) aus den Entwicklungen (3.167) bis (3.169) mit den kompletten Ausdrücken für  $l = 1$  verglichen. Wie für  $l = 0$  werden die exakten durch die analytischen Lösungen für höhere  $\alpha$  genauer wiedergegeben. Aber nur für  $|R_{l=1}(k)|^2$  und  $\alpha = 4, 5$  und  $\alpha = 7$  bzw. für  $\arg R_{l=1}(k)$  und  $\alpha = 6, 7$  werden deutlich bessere Übereinstimmungen durch die kompletten Entwicklungen als nur durch den führenden Term erreicht.



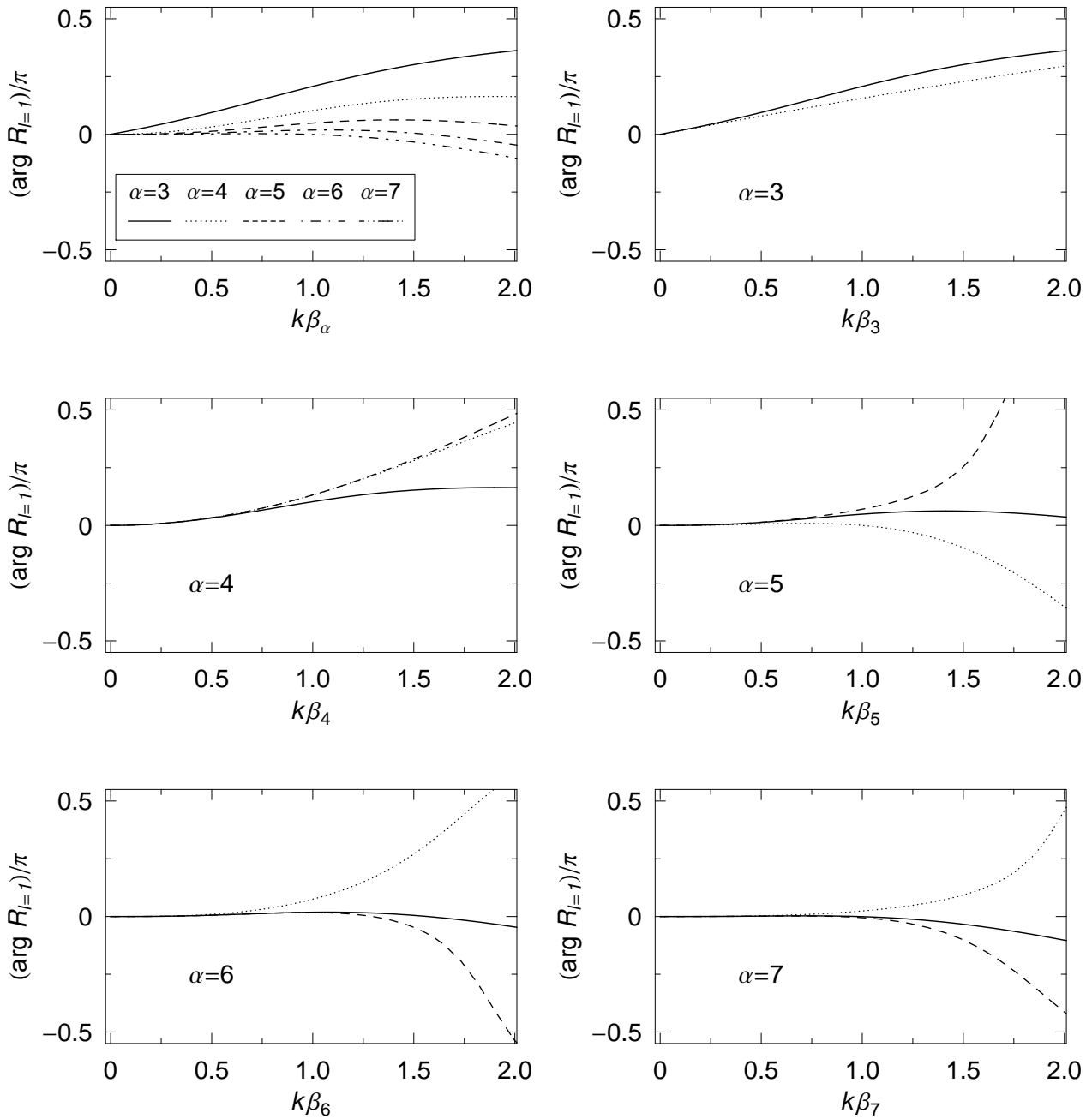
**Abbildung 3.12:** Wahrscheinlichkeit  $|R_{l=0}(k)|^2$  für die  $s$ -Wellenquantenreflexion am homogenen attraktiven Potential (3.42) in drei Dimensionen. Die Ergebnisse für  $\alpha = 3$  bis  $\alpha = 7$  sind im linken oberen Bild dargestellt. In den restlichen Abbildungen, jedes für ein anderes  $\alpha$ , werden die numerischen Ergebnisse (durchgezogene Linien) mit dem führenden Beitrag (gepunktete Linien) bzw. allen Termen der Entwicklungen (3.160) bis (3.163) (gestrichelte Linien) verglichen.



**Abbildung 3.13:** Argument  $\arg R_{l=0}(k)$  für die  $s$ -Wellenquantenreflexion am homogenen attraktiven Potential (3.42) in drei Dimensionen. Die Ergebnisse für  $\alpha = 3$  bis  $\alpha = 7$  sind im linken oberen Bild dargestellt. In den restlichen Abbildungen, jedes für ein anderes  $\alpha$ , werden die numerischen Ergebnisse (durchgezogene Linien) mit dem führenden Beitrag (gepunktete Linien) bzw. allen Termen der Entwicklungen (3.160) bis (3.163) (gestrichelte Linien) verglichen.



**Abbildung 3.14:** Wahrscheinlichkeit  $|R_{l=1}(k)|^2$  für die Reflexion an der  $p$ -Wellen-Zentrifugalbarriere am homogenen attraktiven Potential (3.42) in drei Dimensionen. Die Ergebnisse für  $\alpha = 3$  bis  $\alpha = 7$  sind im linken oberen Bild dargestellt. In den restlichen Abbildungen, jedes für ein anderes  $\alpha$ , werden die numerischen Ergebnisse (durchgezogene Linien) mit dem führenden Beitrag (gepunktete Linien) bzw. allen Termen der Entwicklungen (3.167) bis (3.169) (gestrichelte Linien) verglichen.



**Abbildung 3.15:** Argument  $\arg R_{l=1}(k)$  für die Reflexion an der  $p$ -Wellen-Zentrifugalbarriere am homogenen attraktiven Potential (3.42) in drei Dimensionen. Die Ergebnisse für  $\alpha = 3$  bis  $\alpha = 7$  sind im linken oberen Bild dargestellt. In den restlichen Abbildungen, jedes für ein anderes  $\alpha$ , werden die numerischen Ergebnisse (durchgezogene Linien) mit dem führenden Beitrag (gepunktete Linien) bzw. allen Termen der Entwicklungen (3.167) bis (3.169) (gestrichelte Linien) verglichen.

### 3.4.3 Vergleich zwischen attraktiven und repulsiven Potentialen

Wie in Abschnitt 3.3.3 beschrieben, existiert ein einfacher Zusammenhang zwischen der  $s$ -Wellen-effective-range Theorie für homogene repulsive und attraktive Potentiale. Die Transformation  $\beta_\alpha \rightarrow \beta_\alpha e^{-i\pi\nu}$  (also,  $V_{\text{att}}(r) \rightarrow V_{\text{rep}}(r) = -V_{\text{att}}(r)$ ) und die Verwendung von WKB-Wellen für kleine Abstände  $r \rightarrow 0$  führt zu einem einfachen Zusammenhang zwischen der (reellen) Streulänge  $a_0$  bzw. der (reellen) effektiven Reichweite  $r_{\text{eff},0}$  des repulsiven Falls und der komplexen Streulänge  $\mathcal{A}_0$  bzw. der komplexen effektiven Reichweite  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}$  im attraktiven Fall:

$$\mathcal{A}_0 = a_0 e^{-i\pi\nu} \quad \text{und} \quad \mathcal{R}_{\text{eff},0} = r_{\text{eff},0} e^{-i\pi\nu} . \quad (3.171)$$

Diese Eigenschaft gilt aber nicht nur für die  $s$ -Wellenstreuung, sondern auch für höhere Drehimpulsquantenzahlen  $l$  und ist universell für homogene Potentiale. Wie oben bereits erwähnt, unterscheidet sich die reguläre Lösung von der WKB-Lösung nur durch die Tatsache, dass  $z$  in (3.134) für repulsive Potentiale ( $g^2 > 0$ ) eine reelle Zahl, hingegen für attraktive Potentiale ( $g^2 < 0$ ) eine komplexe Größe ist. Die Jost-Lösungen aber hängen nur von dem Produkt  $qz = kr$  ab – also einer reellen Größe unabhängig vom Vorzeichen von  $g^2$ . Die Jost-Funktionen können durch  $k\beta_\alpha$  ausgedrückt werden (zur Erinnerung  $g^2 = \pm\beta_\alpha^{\alpha-2}$ ). Durch die Substitution von  $\beta_\alpha$  durch  $\beta_\alpha e^{-i\pi\nu}$  können die komplexen Streuphasen  $\delta_l(k)$  aus den reellen Streuphasen  $\delta_l(k)$  abgeleitet werden und die führenden Ordnungen (3.167), (3.168) und (3.169) der Streuphase  $\delta_l(k)$  bleiben erhalten.

Abschließend betrachten wir noch die effective-range Entwicklung für ein beliebiges  $l$  im Fall der attraktiven Potentiale. Für repulsive Potentiale haben Blatt und Jackson gezeigt [25], dass zum einen für Potentiale, die schneller abfallen als  $1/r^{2l+3}$ , eine Streulänge  $a_l$  und zum anderen für Potentiale, die schneller abfallen als  $1/r^{2l+5}$ , eine effektive Reichweite  $r_{\text{eff},l}$ , definiert werden kann. Die führenden Beiträge zur Streuphase können als

$$k^{2l+1} \cot \delta_l(k) = -\frac{1}{a_l^{2l+1}} + \frac{1}{2} r_{\text{eff},l}^{1-2l} k^2 + \mathcal{O}(k^4) \quad (3.172)$$

geschrieben werden und reduzieren sich für  $l = 0$  auf die gewöhnlichen  $s$ -Wellen effective-range Entwicklung [26]. Sowohl  $a_l$  als auch  $r_{\text{eff},l}$  haben die Dimension einer Länge, im Gegensatz zu alternativen, häufig verwendeten Definitionen, z.B. [70, 93].

In ähnlicher Weise ist es möglich, einen Ausdruck für die effective-range Entwicklung für  $l \geq 0$  im Fall der attraktiven singulären Potentiale mit absorbierenden Randbedingungen zu finden. Für diese Potentiale bleibt die Form von (3.172) erhalten:

$$k^{2l+1} \cot \delta_l(k) = -\frac{1}{\mathcal{A}_l^{2l+1}} + \frac{1}{2} \mathcal{R}_{\text{eff},l}^{1-2l} k^2 + \mathcal{O}(k^4) , \quad (3.173)$$

wird aber – wie für die  $s$ -Wellenstreuung – durch eine komplexe Streulänge  $\mathcal{A}_l$  und effektive Reichweite  $\mathcal{R}_{\text{eff},l}$  beschrieben.

Für homogene repulsive Potentiale erhalten wir für die Streulänge  $a_l$  und die effektive Reichweite  $r_{\text{eff},l}$ :

$$a_l = \frac{(-1)^l \nu^{2\nu}}{2} \left( \frac{\Gamma(-1/2 - l) \Gamma(-1 + 2l\nu)}{\Gamma(l + 1/2) \Gamma((1 + 2l)\nu)} \right)^{1/(2l+1)} \beta_\alpha \quad (3.174)$$

und

$$r_{\text{eff},l} = \frac{(-1)^l \nu^{2\nu}}{2} \left( \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(1/2 + l) \Gamma(1 - 2\nu) \Gamma((-1 + 2l)\nu) \Gamma(-(3 + 2l)\nu)}{2^{-2(1+2\nu)} \Gamma(1/2 - l) \Gamma(1/2 - 2\nu) \Gamma^2(-1 + 2l\nu)} \right)^{1/(1-2l)} \beta_\alpha . \quad (3.175)$$

Da sowohl  $a_l$  als auch  $r_{\text{eff},l}$  die Dimension einer Länge haben, existiert wieder ein einfacher Zusammenhang zwischen den Ergebnissen für homogene repulsive Potentiale und den entsprechenden Größen  $\mathcal{A}_l$  und  $\mathcal{R}_{\text{eff},l}$  im attraktiven Fall:

$$\mathcal{A}_l = a_l e^{-i\pi\nu} \quad \text{und} \quad \mathcal{R}_{\text{eff},l} = r_{\text{eff},l} e^{-i\pi\nu} . \quad (3.176)$$

Erneut ist das Verhältnis  $\mathcal{R}_{\text{eff},l}/\mathcal{A}_l = r_{\text{eff},l}/a_l$  eine reelle Zahl.

## 3.5 Anwendung: Streuung ultrakalter Atome an einer leitenden Kugel

Bei der Streuung von ultrakalten Atomen an einer leitenden Wand ist die mittlere Streulänge  $\bar{a}$  eine experimentell nicht leicht zugängliche Größe, da nur der Betrag, nicht aber die Phase der Reflexionswahrscheinlichkeit, direkt gemessen werden kann (vgl. Abschnitt 2.3). Ebenso dominiert unabhängig von der Wahl der Atome immer das Casimir-Polder-Potential proportional zu  $-1/r^4$ . Das Streuverhalten ist größtenteils unempfindlich gegenüber dem nicht retardierten van der Waals-Potential nahe der Oberfläche und gegenüber dem Verhalten der Shape-Funktion in der Übergangszone [42]. Ein flexibleres Abtasten von Atom-Oberflächenpotentialen kann mit Hilfe der Streuung von ultrakalten Atomen an gekrümmten Oberflächen erreicht werden. Der Wirkungsquerschnitt als messbare Größe hängt dann nicht nur vom Betrag, sondern auch von der Phase der Streumatrix  $S$  ab. So kann bei geeigneter Wahl des Streuwinkels sowohl die Schwellenlänge  $b$  als auch die mittlere Streulänge und ein weiterer Parameter experimentell bestimmt werden.

Die einfachste Oberfläche dieser Art ist eine Kugel, bei der der Radius  $R_K$  ein zusätzlicher Parameter ist. Dieser kann so gewählt werden, dass verschiedene Regime des Atom-Kugel-Potentials untersucht werden können.

In diesem Abschnitt beschreiben wir die elastische Streuung eines polarisierbaren Atoms an einer leitenden Kugel mit einem Radius im Nanometerbereich. Hierfür beschreiben wir in Abschnitt 3.5.1 die generelle Struktur des Atom-Kugel-Potentials und gehen in Abschnitt 3.5.2 auf den führenden Beitrag zum Wirkungsquerschnitt ein. Als Anwendung untersuchen wir in 3.5.3 das Streuverhalten von zwei verschiedenen Atomen, metastabiles Helium und Natrium, an einer leitenden Kugel mit dem Radius 200 bzw. 2000 a.u..

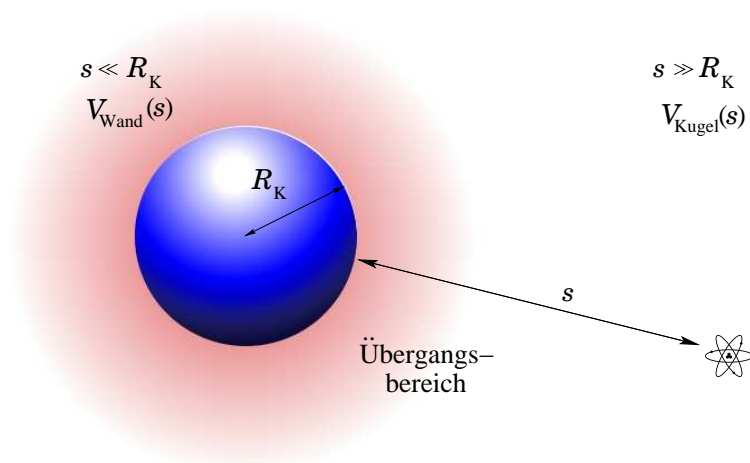
### 3.5.1 Atom-Kugel-Potential

Ebenso wie bei der Wand ist das asymptotische Verhalten des Wechselwirkungspotentials zwischen einem polarisierbaren Atom und einer leitenden Kugel abhängig vom Abstand  $s$  des Atoms zur Oberfläche der Kugel. Als zusätzlicher Parameter beeinflusst der Radius  $R_K$  der Kugel das asymptotische Verhalten des Potentials und wir können das Potential in verschiedene Bereiche unterteilen (s. Abbildung 3.16). Sehr nahe an der Oberfläche der Kugel finden im Allgemeinen komplizierte Reaktionen zwischen dem Atom und der Kugel statt. Die Wechselwirkung kann nicht mehr mit einem einfachen lokalen Potential beschrieben werden. Jenseits dieses Nahbereichs wird das Potential für kleine Abstände  $s$  im Vergleich zum Radius  $R_K$  dem eines Atoms vor einer Wand entsprechen und kann nach Gleichung (2.51) mit der charakteristische Länge  $L$  (vgl. Gleichung (2.50)) durch das Potential

$$V_{\text{Wand}}(s) = -\frac{C_3}{s^3 v(s/L)} \quad (3.177)$$

ausgedrückt werden. Der Koeffizient  $C_3$  (bzw.  $C_4$ ) entspricht dem aus Gleichung (2.48) (bzw. (2.49)) und  $v(x)$  ist die Shape-Funktion (2.52), die ein richtiges Verhalten des Potentials im





**Abbildung 3.16:** Schematische Darstellung der unterschiedlichen Randbedingungen, denen ein realistisches Atom-Kugel-Potential genügen muss. Für kleine Abstände  $s$  im Vergleich zum Radius der Kugel entspricht das Potential dem der Wechselwirkung zwischen einem Atom und einer Wand. Für große Abstände im Vergleich zum Radius ist das nicht-retardierte Potential proportional zu  $-1/s^6$ , wohingegen das retardierte proportional zu  $-1/s^7$  ist.

Übergangsbereich zwischen dem retardierten zum nicht-retardierte Bereich gewährleistet:

$$v(x) \stackrel{x \rightarrow 0}{\sim} 1, \quad v(x) \stackrel{x \rightarrow \infty}{\sim} x. \quad (3.178)$$

Für große Abstände  $s$  im Vergleich zum Radius  $R_K$  der Kugel können wir wieder zwischen einem nicht-retardierte und einem retardierte Bereich unterscheiden: für "kleine" Abstände (aber immer noch größer als  $R_K$ ) verhält sich das Potential wie ein nicht-retardierte van der Waals-Potential,  $V(s) = -C_6/s^6$  und für große Abstände wie ein hoch retardierte Casimir-Potential,  $V(s) = -C_7/s^7$ . In Analogie zu (3.177) wählen wir folgenden Ansatz für das Potential zwischen einem Atom und einer Kugel:

$$V_{\text{Kugel}}(s) = -\frac{C_6}{s^6 v(s/L)}. \quad (3.179)$$

$L'$  ist die charakteristische Länge des Potentials

$$L' = \frac{C_7}{C_6} \quad (3.180)$$

und  $v(x)$  eine Shape-Funktion, welche die Randbedingungen (3.178) erfüllt. Die Koeffizienten  $C_6$  und  $C_7$  sind sowohl von der Polarisierbarkeit des Atoms, als auch von der Polarisierbarkeit der Kugel abhängig. Für eine leitende Kugel mit einer frequenzunabhängigen Dipolpolarisierbarkeit von  $R_K^3$  stehen sie mit den entsprechenden Stärkeparametern  $C_3$  [94] und  $C_4$  [95] aus (2.48) und (2.49) über den Zusammenhang (s. Anhang B.2)

$$C_6 = 12R_K^3 C_3, \quad C_7 = \frac{46}{3} R_K^3 C_4 \quad (3.181)$$

in Verbindung. Die Länge  $L'$  in (3.180) ist unabhängig vom Radius  $R_K$  und von der gleichen Größenordnung wie die Länge  $L$  aus (2.50) für den Fall der Wand,

$$L' = \frac{23}{18} L. \quad (3.182)$$

Sowohl  $L$  als auch  $L'$  sind typische Längen für den Übergangsbereich zwischen dem nicht-retardierten van der Waals-Anteil des Potentials für kleine Abstände und dem hoch retardierten Casimir-Anteil bei großen Abständen.

Um das Streuverhalten von Atomen an einer Kugel richtig beschreiben zu können, benötigen wir ein Potential, das das asymptotische Verhalten in allen Grenzwerten korrekt wiedergibt; ein exaktes Potential ist nicht bekannt. Ein mögliches Atom-Kugel-Potential, das zumindest das asymptotische Verhalten für kleine und große Abstände bzw. unterschiedliche Radien der Kugel richtig beschreibt, liefert folgender Ansatz:

$$V(s) = - \left[ \frac{s^3}{C_3} v\left(\frac{s}{L}\right) + \frac{s^6}{C_6} v\left(\frac{s}{L'}\right) \right]^{-1}. \quad (3.183)$$

Um den Einfluss der verschiedenen Beiträge untersuchen zu können, verwenden wir nur eine Shape-Funktion  $v(x)$  in beiden Termen und drücken die Stärkeparameter  $C_\alpha$  gemäß (2.30) durch die Länge  $\beta_\alpha$  aus:

$$C_\alpha = \frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}} (\beta_\alpha)^{\alpha-2}; \quad \beta_\alpha = \left( \frac{2\mathcal{M}}{\hbar^2} C_\alpha \right)^{1/(\alpha-2)}. \quad (3.184)$$

Eingesetzt in Gleichung (3.183) erhalten wir:

$$V(s) = - \frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}} \left[ \frac{s^3}{\beta_3} v\left(\frac{s}{L}\right) + \frac{s^6}{(\beta_6)^4} v\left(\frac{s}{L'}\right) \right]^{-1}, \quad (3.185)$$

wobei  $L$  und  $L'$  durch die Beziehung

$$L = \frac{(\beta_4)^2}{\beta_3}, \quad L' = \frac{(\beta_7)^5}{(\beta_6)^4}, \quad (3.186)$$

miteinander verknüpft sind. Für die konkrete Anwendung in Abschnitt 3.5.3 wählen wir für das Potential (3.183) bzw. (3.185) wieder die zwei Shape-Funktionen

$$v_1(x) = 1 + x, \quad v_2(x) = \frac{\pi/2}{\arctan[\pi/(2x)]}, \quad (3.187)$$

die von Shimizu ( $v_1(x)$ ) [11] bzw. Holstein ( $v_2(x)$ ) [61] vorgeschlagen wurden.

### 3.5.2 Elastische Streuung

Zur Bestimmung der komplexen Streuphase  $\delta_l(k)$  lösen wir die radiale Schrödinger-Gleichung mit dem effektiven Potential

$$V_{\text{eff}}(r) = V(s) + \frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}} \frac{l(l+1)}{r^2}, \quad r = s + R_K > R_K, \quad (3.188)$$

und den Randbedingungen (2.34), um Absorption an der Oberfläche der Kugel zu beschreiben. Nahe der Oberfläche der Kugel,  $r \rightarrow R_K$ , dominiert der attraktive singuläre Anteil des Potentials  $V(s)$  in (3.188) und die Bewegung des Teilchens wird semiklassisch. Dies rechtfertigt den Ansatz von WKB-Wellen.

Für  $l = 0$  verschwindet die Zentrifugalbarriere und die radiale Schrödinger-Gleichung entspricht formal einer eindimensionalen Schrödinger-Gleichung, bei der das Potential im Grenzwert  $r \rightarrow R_K$  divergiert. Da die Schrödinger-Gleichung als Funktion von  $r = s + R_K$  definiert

$\alpha$	$\bar{a}/\beta_\alpha$	$b/\beta_\alpha$	$\Lambda/(\bar{a} - ib)$	$\mathcal{A}_1(R_K \rightarrow 0)/(\bar{a} - ib)$
6	0.4779888	0.4779888	1	0.8103554
7	0.5388722	0.3915136	0.6496249	0.7404124

**Tabelle 3.3:** Schwanzparameter  $\mathcal{A}_0 - R_K = \bar{a} - ib$ ,  $\Lambda$  und die  $p$ -Wellenstreulänge  $\mathcal{A}_1(R_K \rightarrow 0)$  für homogene Atom-Oberflächen-Potentiale  $V(s) = -C_\alpha/s^\alpha$  für  $\alpha = 6$  bzw.  $\alpha = 7$  als Funktion der assoziierten charakteristischen Länge  $\beta_\alpha$  aus (3.184).

wird, ist die mittlere Streulänge  $\bar{a}_{R_K}$  die Summe aus der Streulänge  $\bar{a}$  des Potentials  $V(s)$  und dem Radius  $R_K$  der Kugel,

$$\mathcal{A}_0(R_K) = \bar{a} + R_K - ib . \quad (3.189)$$

Die radiusabhängige Streuphase  $\delta_{l=0}(k)$  folgt aus Gleichung (3.73):

$$\delta_{l=0}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -(\bar{a}_{R_K} - ib)k + \frac{1}{3}(k\Lambda)^3 . \quad (3.190)$$

Für die homogenen Potentiale  $-C_\alpha/s^\alpha$  haben wir die Schwanzparameter  $\bar{a}$ ,  $b$  und  $\Lambda$  in den Abschnitten 3.3 bzw. 3.4 analytisch bestimmt. Sie hängen nicht explizit vom Radius der Kugel ab, aber implizit, da die Längenparameter  $\beta_6$  und  $\beta_7$  (bzw. die Stärkeparameter  $C_6$  und  $C_7$ ) aus (3.184) eine Funktion von  $R_K$  sind.

Für die  $p$ -Wellenstreuung ( $l = 1$ ) ist der führende Beitrag  $\mathcal{A}_1$  zur Streuphase  $\delta_{l=1}(k)$  eine nicht-triviale Funktion vom Radius  $R_K$  der Kugel,

$$\delta_{l=1}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} (k\mathcal{A}_1(R_K))^3 . \quad (3.191)$$

Sie ist nur im Grenzfall  $R_K \rightarrow 0$  aus den Gleichungen (3.167) für  $\alpha = 6$  und (3.169) für  $\alpha = 7$  analytisch bekannt (vgl. Tabelle 3.3).

Mit (3.190) und (3.191) können wir den differentiellen Wirkungsquerschnitt (3.17) bis einschließlich der Ordnung  $\mathcal{O}(E)$  bestimmen, da hier nur Beiträge der  $s$ -Welle und ein Interferenzterm zwischen der  $s$ - und  $p$ -Welle berücksichtigt werden müssen:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} |\mathcal{A}_0|^2(1 - 2bk) + k^2 \left[ F(l=0) + \tilde{F}(l=0,1) \cos\theta \right] . \quad (3.192)$$

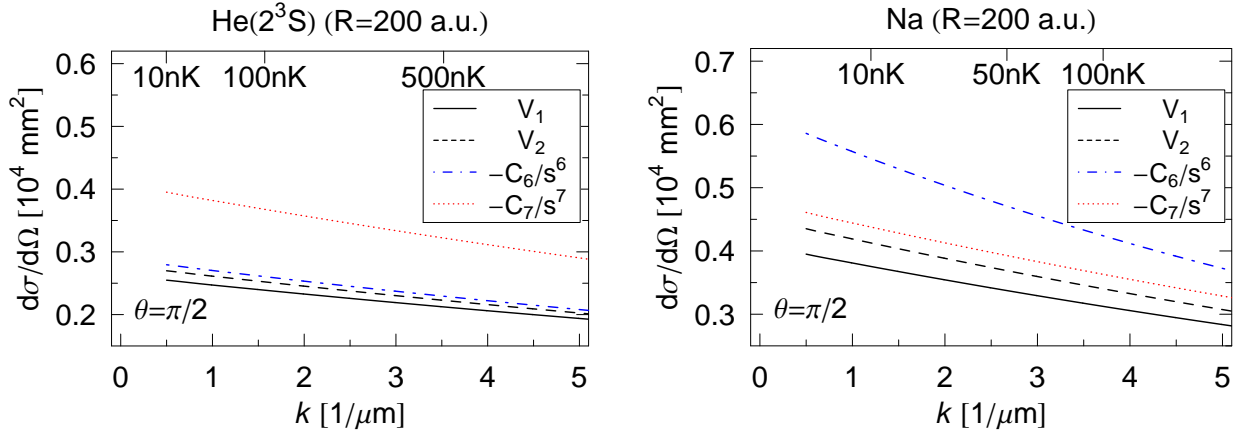
$F(l=0)$  ist eine wohldefinierte Funktion von  $\mathcal{A}_0$  und  $\Lambda$ , während  $\tilde{F}(l=0,1)$  auch von  $\mathcal{A}_1$  abhängig ist:

$$F(l=0) = \frac{1}{3} \left( -2|\mathcal{A}_0|^2(\mathcal{A}_0^2 + (\mathcal{A}_0^*)^2) + 3|\mathcal{A}_0|^4 - (\Lambda^3\mathcal{A}_0^* + \mathcal{A}_0(\Lambda^*)^3) \right) , \quad (3.193a)$$

$$\tilde{F}(l=0,1) = 3(\mathcal{A}_0^*\mathcal{A}_1^3 + \mathcal{A}_0(\mathcal{A}_1^*)^3) . \quad (3.193b)$$

### 3.5.3 Anwendung

Für eine konkrete Anwendung verwenden wir zwei relativ unterschiedliche Arten von Atomen, nämlich metastabile  $\text{He}(2^3S)$ -Atome, die in verschiedenen Experimenten genutzt werden, z.B. [96], und Na-Atome im Grundzustand, welche zur Untersuchung von Quantenreflexion in Bose-Einstein Kondensaten verwendet werden [46, 49].



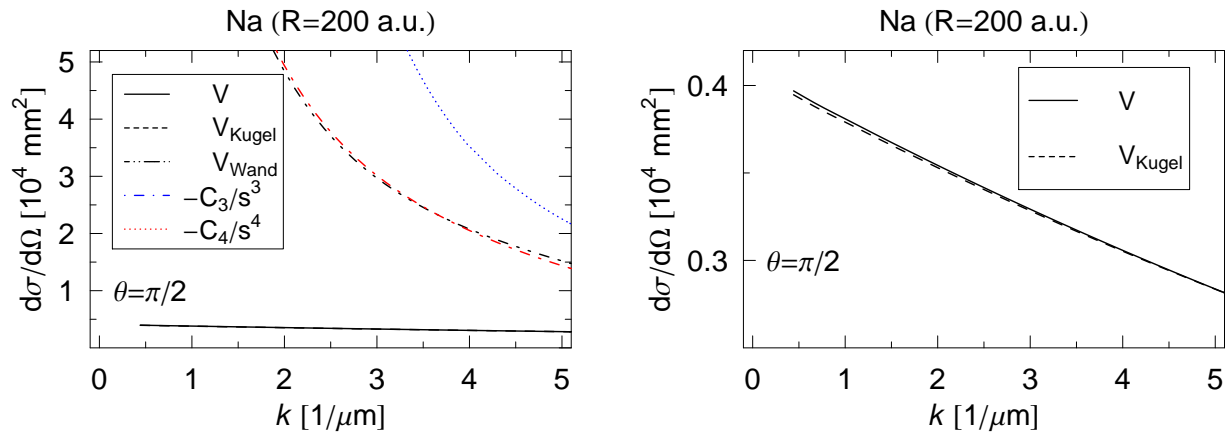
**Abbildung 3.17:** Differenzieller Wirkungsquerschnitt (3.192) bei  $\theta = \frac{\pi}{2}$  für die elastische Streuung von He( $2^3S$ )-Atomen (linke Seite) und Na-Atomen im Grundzustand (rechte Seite) an einer absorbierenden Kugel mit einem Radius von  $R_K = 200$  a.u.. Die Parameter  $C_\alpha, \beta_\alpha$ , die die Potentialstärke im nicht-retardierten van der Waals-Potential und dem hoch retardierten Casimir-Potential beschreiben, sind in Tabelle 3.4 aufgeführt (s. auch (3.181), (3.194)). Die blauen Linien zeigen das Ergebnis für ein homogenes  $-C_6/s^6$ -Potential und die roten Linien das für das homogene Potential  $-C_7/s^7$ . Die durchgezogenen und die gepunkteten Linien zeigen den Wirkungsquerschnitt für die realistischeren Atom-Kugel-Potentiale (3.183), (3.185), die die zwei Versionen (3.187) der Shape-Funktion enthalten, die den Übergang vom nicht-retardierten zum retardierten Regime beschreiben. Für Helium dominiert das  $-1/s^6$ -Potential, wohingegen für Natrium der differentielle Wirkungsquerschnitt besser durch ein  $-1/s^7$ -Potential wiedergegeben wird.

Um eine möglichst große Anzahl von Informationen aus einem Streuexperiment zu erhalten nutzen wir zunächst aus, dass der differentielle Wirkungsquerschnitt bis zur Ordnung  $\mathcal{O}(E)$  nach (3.192) nur durch die Beiträge der  $s$ - und  $p$ -Welle bestimmt wird. Wir können den isotropen  $s$ -Wellenanteil herausfiltern, wenn wir  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  senkrecht zum Einfall betrachten. Für  $\theta = \frac{\pi}{2}$  verschwinden alle winkelabhängigen Anteile proportional zu  $\cos\theta$ .

Abbildung 3.17 zeigt den differentiellen Wirkungsquerschnitt (3.192) bei  $\theta = \frac{\pi}{2}$  für die elastische Streuung von metastabilen He( $2^3S$ )-Atomen (linke Abbildung) und Na-Atomen im Grundzustand (rechte Abbildung) an einer absorbierenden Kugel mit einem Radius von 200 a.u. für Wellenzahlen  $k$  bis zu  $5/\mu\text{m}$ . Dies entspricht einem Temperaturbereich von bis etwa  $1 \mu\text{K}$  für Helium und  $200 \text{ nK}$  für Natrium. Die durchgezogenen und gestrichelten Linien zeigen die Resultate für das Potential (3.183) mit den Shapefunktionen  $v_1(x)$  bzw.  $v_2(x)$ , (vgl. (3.187)). Für Helium liegt der differentielle Wirkungsquerschnitt der beiden Shape-Funktionen nahe an dem Ergebnis des nicht-retardierten  $-C_6/s^6$ -Potentials (blaue Linie), wohingegen für Natrium das  $-C_7/s^7$ -Potential (rote Linie) die Ergebnisse besser widerspiegelt. Die Form des Potentials in der Übergangszone hat keinen entscheidenden Einfluss auf die Steigung, welche die Schwellenlänge  $b$  bestimmt und nur einen kleinen Einfluss auf den Schwellenwert des Wirkungsquerschnitts, der nach (3.192) durch  $(\bar{a} + R_K)^2 + b^2$  gegeben ist.

Zumindest bis zur Ordnung  $\mathcal{O}(E)$  enthält der Wirkungsquerschnitt in Abbildung 3.17 nur den  $s$ -Wellenbeitrag der Quantenreflexion am nichtklassischen Gebiet des Potentialschwanzes. Wir können aus einer derartigen Messung mehr Informationen gewinnen als bei der Messung der Quantenreflexionswahrscheinlichkeit an einer flachen Wand, bei der nur der Betrag, nicht aber die Phase von  $R(k)$  leicht zugänglich ist.<sup>14</sup> Mehr Informationen über das Poten-

<sup>14</sup>Um Informationen über die Phase zu erhalten, muss die Zeitverschiebung  $\Delta t$  (vgl. Gleichung (3.33)) von Wellenpaketen betrachtet werden.

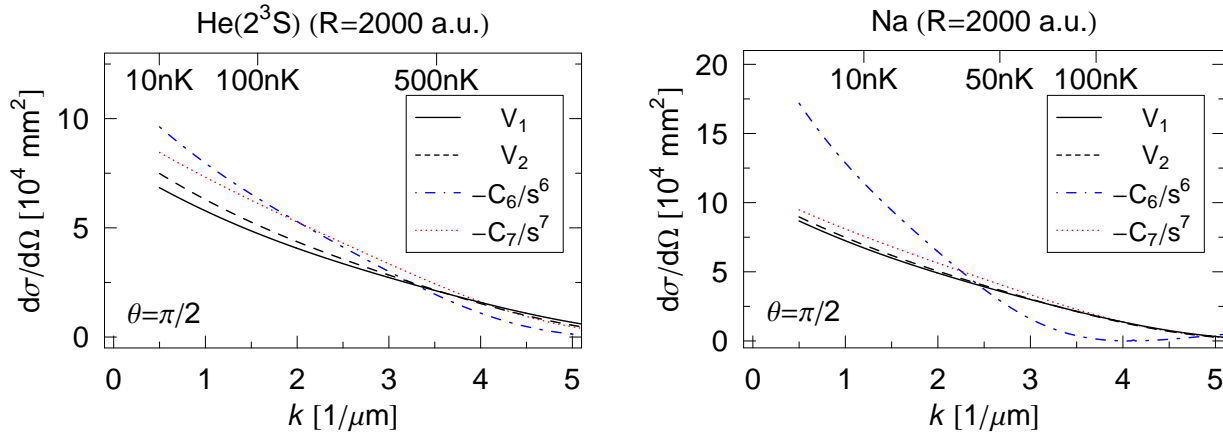


**Abbildung 3.18:** Einfluss des Atom-Wand-Potentials auf den differentiellen Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/d\Omega$  bei  $\theta = \frac{\pi}{2}$  für Na-Atome und einer Kugel vom Radius  $R_K = 200$  a.u.. Die verschiedenen Linien zeigen  $d\sigma/d\Omega$  für verschiedene Formen des Potentials (3.183): die durchgezogene Linie für das vollständige Potential (3.183), die gestrichelte Linie für das Potential (3.179), die gestrichpunkt-punktete Linie für das Potential  $V_{\text{Wand}}$  aus (3.177), die blaue, gestrichpunktete Linie für das  $-C_3/s^3$ -Potential und die rote, gepunktete Linie für das  $-C_4/s^4$ -Potential. Der Einfluss von  $V_{\text{Wand}}$  ist vernachlässigbar. Das Ergebnis für das vollständige Potential (3.183) wird sehr gut durch das vereinfachte Potential (3.177) wiedergegeben (rechtes Bild).

tial erhalten wir aus dem elastischen Wirkungsquerschnitt, wenn wir den  $\theta$ -unabhängigen Anteil des Ausdrucks (3.192) an das führende Schwellenverhalten des Wirkungsquerschnitts bei  $\theta = \frac{\pi}{2}$  anpassen. Dieser Fit ermöglicht eine Bestimmung von  $\bar{a}$  und  $b$  sowie der Größe  $F(l=0)$ , die von  $\Lambda$  abhängt. Der zweite Term in der Klammer in (3.183) beschreibt den Übergang vom  $-C_6/s^6$  in das  $-C_7/s^7$ -Potential bei großen Abständen im Vergleich zum Radius der Kugel und dominiert den Wirkungsquerschnitt. Ein Einfluss von der flachen Wand durch die Terme  $-C_3/s^3$  und  $-C_4/s^4$ , welche bei kleinen Abständen zur Oberfläche an Bedeutung gewinnen, ist in unseren Berechnungen kaum spürbar aufgetreten. Wir haben dies getestet, indem wir den  $s^3v(s/L)$ -Term in (3.183) weggelassen haben, so dass das Potential die Form (3.179) angenommen hat. Abbildung 3.18 zeigt dieses Verhalten am Beispiel Natrium und  $R_K = 200$  a.u. für den differentiellen Wirkungsquerschnitts bei  $\theta = \frac{\pi}{2}$ . Die Linien zeigen  $d\sigma/d\Omega$  für verschiedene Variationen des Potentials (3.183) (linkes Bild): die durchgezogenen Linien für das vollständige Potential (3.183), die gestrichelten Linien für das Potential  $V_{\text{Kugel}}$  (3.179), die gestrichpunkt-punktete Linie für das Potential  $V_{\text{Wand}}$  aus (3.177), die blaue, gestrichpunktete Linie für das  $-C_3/s^3$ -Potential und die rote, gepunktete Linie für das  $-C_4/s^4$ -Potential. Im rechten Bild wird der Abschnitt von  $d\sigma/d\Omega$  im Wertebereich zwischen ca.  $0.25 \cdot 10^4 \text{ mm}^2$  bis ca.  $0.45 \cdot 10^4 \text{ mm}^2$  detaillierter dargestellt. Es ist deutlich erkennbar, dass die Ergebnisse für das vollständige Potential (3.183) nahezu deckungsgleich durch das vereinfachte Potential (3.179) wiedergegeben werden, der Einfluss des Potentials (3.177) kann vernachlässigt werden.

Eine interessante Konsequenz folgt aus Gleichung (3.181): sind die Stärkeparameter  $C_6$  und  $C_7$  sowie der Radius  $R_K$  für *eine* Kugel bekannt, können wir diese Parameter mit Gleichung (3.181) für einen beliebigen Wert von  $R_K$  bestimmen und die  $R_K$ -unabhängigen Potentialstärken  $C_3$  und  $C_4$  berechnen, welche die Wechselwirkung des gleichen Atoms vor einer leitenden flachen Wand beschreiben.

Die unterschiedlichen Resultate für metastabiles Helium und Natrium im Grundzustand in Abbildung 3.17 lassen sich durch die richtige Bewertung der charakteristischen Längen  $\beta_\alpha$ ,



**Abbildung 3.19:** Analog zu Abbildung 3.17, nur mit  $R_K = 2000$  a.u.. In beiden Fällen wird der differentielle Wirkungsquerschnitt besser durch ein  $-1/s^7$ -Potential beschrieben.

die mit den Potentialstärken  $C_\alpha$  nach (3.184) verknüpft sind, verstehen.  $\beta_6$  und  $\beta_7$  hängen von den  $R_K$ -unabhängigen Längen  $\beta_3$  und  $\beta_4$  sowie vom Radius  $R_K$  der Kugel ab, und berechnen sich nach Gleichung (3.181) aus:

$$\begin{aligned}
 (\beta_6)^4 &= 12R_K^3\beta_3 \Rightarrow \beta_6 = R_K^{\frac{3}{4}}(12\beta_3)^{\frac{1}{4}}, \\
 (\beta_7)^5 &= \frac{46}{3}R_K^3(\beta_4)^2 \Rightarrow \beta_7 = R_K^{\frac{3}{5}}\left(\sqrt{\frac{46}{3}}\beta_4\right)^{\frac{2}{5}}.
 \end{aligned} \tag{3.194}$$

In Tabelle 3.4 sind die Werte von  $\beta_6$  und  $\beta_7$  für Helium und Natrium für die zwei Radien  $R_K = 200$  a.u. und  $R_K = 2000$  a.u. aufgeführt. Im Fall von Helium und einem Radius der Kugel von  $R_K = 200$  a.u. sind sowohl  $\beta_6$  als auch  $\beta_7$  deutlich kleiner als die Länge  $L'$ . Die charakteristischen Längen des Potentialschwanzes liegen diesseits der Übergangzone des nicht-retardierte von der Waals-Regime und der Wirkungsquerschnitt der realistischeren Potentiale ähneln den Ergebnissen eines reinen nicht-retardierte  $-C_6/s^6$ -Potentialschwanzes. Im Vergleich hierzu sind für Natrium sowohl  $\beta_6$  und  $\beta_7$  deutlich größer als  $L'$  und der Wirkungsquerschnitt wird besser durch das retardierte  $-C_7/s^7$ -Potential beschrieben. Diese Interpretation wird durch die Wirkungsquerschnitte (bei  $\theta = \frac{\pi}{2}$ ) der gleichen Atome bei gleichem Wellenzahlspektrum aber mit einer Kugel vom Radius 2000 a.u. bestätigt (s. Abbildung 3.19). Für Natrium hat die Differenz zwischen  $L'$  und  $\beta_6$  bzw.  $\beta_7$  weiter zugenommen, so dass der Wirkungsquerschnitt noch näher an dem retardierte  $-C_7/s^7$ -Potential liegt und nahezu unabhängig vom nicht-retardierte Anteil des Potentials sowie der Shapefunktion in der Übergangzone ist.

Für Helium und  $R_K = 2000$  a.u. sind  $\beta_6$  und  $\beta_7$  um etwa einen Faktor zwei größer als  $L'$ , ähnlich zu Natrium und einer Kugel mit  $R_K = 200$  a.u.. Auch der Wirkungsquerschnitt ist bis  $k = 1/\mu\text{m}$  mit dem von Natrium und  $R_K = 200$  a.u. bis zu  $k = 5/\mu\text{m}$  vergleichbar. Dies entspricht in etwa gleichen Werten von  $k\beta_6$  und  $k\beta_7$ . Wie bei Natrium und  $R_K = 200$  a.u. wird die Steigung von  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  mit den realistischeren Potentialschwanzes nahe der Schwelle besser durch das retardierte  $-C_7/s^7$ -Potential beschrieben, die Grenzwerte jedoch weichen davon ab. Am Beispiel von Helium erkennen wir, dass durch eine Vergrößerung von  $R_K$  von 200 a.u. auf 2000 a.u. die wichtigen charakteristischen Längen  $\beta_6$  und  $\beta_7$  derart zunehmen, dass sie in den fernen Teil der Übergangzone oder darüber hinaus verschoben werden. Dadurch wird der Wirkungsquerschnitt weniger für den nicht-retardierte und mehr für den retardierte Teil des Atom-Kugel-Potentials empfindlich.

Die führende Abweichung vom isotropen Anteil des Wirkungsquerschnitts wird durch den

Längen	$\beta_3$	$\beta_4$	$L$	$\beta_6(200)$	$\beta_7(200)$	$\beta_6(2000)$	$\beta_7(2000)$	$L'$
He( $2^3S$ )	27 740	8 680	2 716	1 277	1 560	7 184	6 211	3 470
Na	158 300	10 900	750	1 974	1 708	11 100	6 803	959

**Tabelle 3.4:** Längen (in a.u.), die sich aus den Potentialstärken  $C_3 = 1.9009$  a.u.,  $C_4 = 5163$  a.u. für He( $2^3S$ ) [44] und  $C_3 = 1.889$ ,  $C_4 = 1417$  für Na [66] nach (3.181), (3.184) ergeben und welche den nicht-retardierten und retardierten Anteil des Potentials zwischen einem Atom und einer flachen leitenden ( $\beta_3, \beta_4$ ) bzw. zwischen einem Atom und einer leitenden Kugel mit dem Radius  $R_K$  ( $\beta_6(R_K), \beta_7(R_K)$ ) charakterisieren.  $L$  und  $L'$  sind  $R_K$ -unabhängige Längen, (2.50), (3.180), (3.182), (3.186), die charakteristisch für die Übergangszone zwischen dem nichtretardierten van der Waals-Regime für vergleichsweise kleine Abstände und dem hoch retardierten Casimir-Polder-Regime für große Abstände sind.

zweiten Term in der Klammer auf der rechten Seite von (3.192) beschrieben und kann mit Hilfe der dimensionslosen Asymmetrie

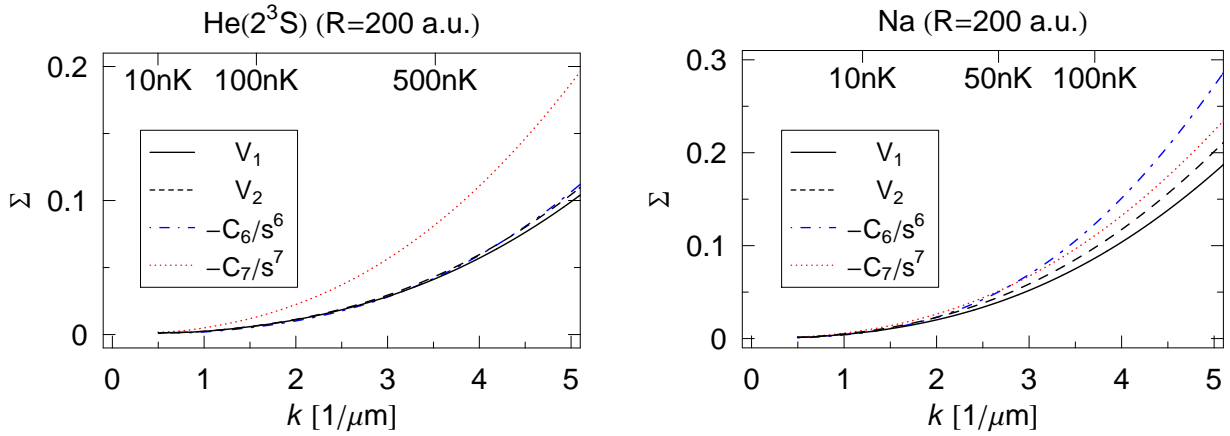
$$\Sigma(k) \stackrel{\text{Def.}}{=} \frac{\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta = 0) - \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta = \pi)}{\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta = 0) + \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta = \pi)} = 2k^2 \tilde{F}(l = 0, l = 1) + \text{Terme höherer Ordnung} \quad (3.195)$$

untersucht werden.

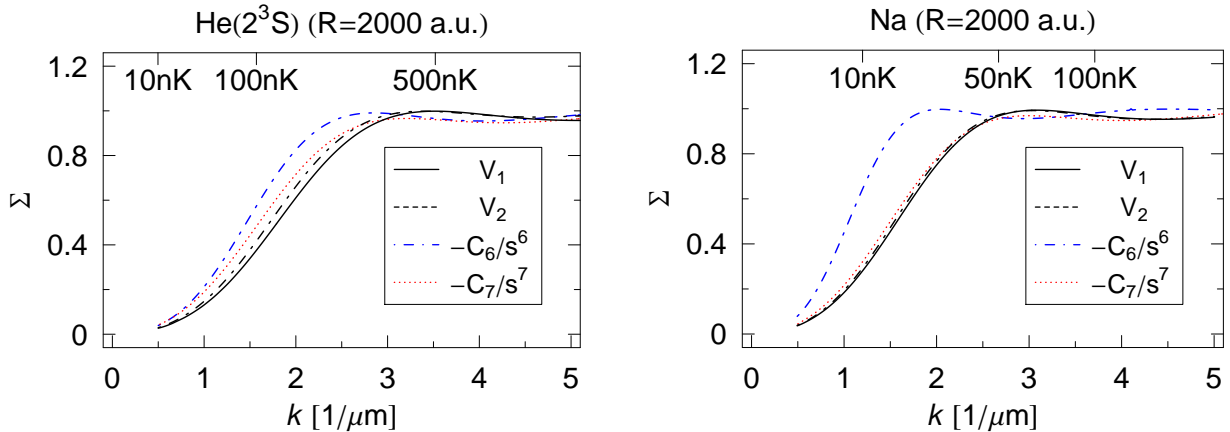
Abbildung 3.20 zeigt die Asymmetrie (3.195) für die Streuung von He( $2^3S$ )- und Na-Atomen an einer absorbierenden Kugel mit einem Radius von 200 a.u. im gleichen Impulsbereich wie in den Abbildungen 3.17 und 3.19. Die Resultate für Helium (linke Seite) sind sehr nahe an den Ergebnissen des nicht-retardierten  $-C_6/s^6$ -Potentials (blaue Linie). Sie sind im Wesentlichen unbeeinflusst von dem Potential in der Übergangszone. Auch für Natrium (rechte Seite) wird die Asymmetrie nahe der Schwelle bis etwa  $k \approx 2/\mu\text{m}$  besser durch das  $-C_6/s^6$ -Potential als durch das  $-C_7/s^7$ -Potential (rote Linie) wiedergegeben. Die Asymmetrien für eine Kugel mit dem Radius  $R_K = 2000$  a.u. sind in Abbildung 3.21 dargestellt. Die Asymmetrie für Natrium ist hier sehr nahe an dem homogenen  $-C_7/s^7$ -Potential, auch für "höhere" Impulse jenseits der führenden Terme (3.192), die den Wirkungsquerschnitt in Schwellennähe bestimmen. Für Helium und  $R_K = 2000$  a.u. wird die Asymmetrie weder durch ein reines  $-C_6/s^6$ -Potential noch durch das  $-C_7/s^7$ -Potential wiedergegeben, auch wenn letzteres eine bessere Approximation für moderate Wellenzahlen bis  $k \approx 2/\mu\text{m}$  darstellt. Der Parameter  $\tilde{F}$  in (3.195) verschwindet für ein homogenes  $-C_6/s^6$ -Potential und ein endliches  $C_6$  im Grenzwert  $R_K \rightarrow 0$ . Deswegen ist die Asymmetrie auf der linken Seite in Abbildung 3.20 für das nichtretardierte Potential kleiner als für ein  $-C_7/s^7$ -Potential.

## 3.6 Zusammenfassung der Ergebnisse

Das Ziel dieses Kapitels lag darin, das Streuverhalten von ultrakalten Atomen an absorbierenden Nanokugeln zu untersuchen. Nach einer Einführung in die Streutheorie (Abschnitt 3.1) sowie in die Besonderheiten der schwellennahen Quantenreflexion (Abschnitt 3.2) haben wir mit Hilfe einer effective-range Theorie für Quantenreflexion an attraktiven Potentialen den nächsthöheren Beitrag zur komplexen  $s$ -Wellenstreuphase  $\delta_{l=0}(k)$  bestimmt (vgl. Gleichung (3.73)). Für homogene, singuläre Potentiale ist das Verhältnis aus der komplexen Streulänge  $\mathcal{A}$  und der komplexen effektiven Reichweite  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}$  reell. Dies wurde in Abschnitt 3.4 auch für höhere Partialwellen  $l > 0$  mit der Theorie der Jost-Funktionen gezeigt, indem wir die führenden Beiträge zur komplexen Streuphase  $\delta_l(k)$  für die attraktiven Potentiale proportional zu  $-1/r^\alpha$  bestimmt haben. Ein einfacher Zusammenhang zwischen den reellen Größen aus der Streuung an repulsiven Potentialen und den komplexen Größen



**Abbildung 3.20:** Asymmetrie (3.195) für die elastische Streuung von He( $2^3S$ )-Atomen (linke Seite) und Na-Atomen im Grundzustand (rechte Seite) an einer absorbierenden Kugel mit dem Radius  $R_K = 200$  a.u.. Die Parameter  $C_\alpha$  und  $\beta_\alpha$ , welche die Potentialstärke des nicht-retardierten van der Waals-Potentials bzw. des hoch retardierten Casimir-Potentials beschreiben, sind in Tabelle 3.4 angegeben (s. auch (3.181), (3.194)). Die blauen Linien zeigen das Resultat für ein homogenes van der Waals-Potential,  $-C_6/s^6$ , und die roten Linien zeigen die Asymmetrie für das homogene Casimir-Potential,  $-C_7/s^7$ . Die durchgezogenen und die gestrichelten Linien sind die Asymmetrien für die realistischeren Atom-Kugel-Potentials (3.183), (3.185), welche die zwei Versionen der Shape-Funktion (3.187) zur Beschreibung des Übergangs vom nicht-retardierten zum retardierten Regime enthalten.



**Abbildung 3.21:** Analog zu Abbildung 3.20, nur für  $R_K = 2000$  a.u..

bei der Streuung an attraktiven Potentials kann durch die Transformation (3.159) hergestellt werden. Abschließend haben wir mit Hilfe dieser Ergebnisse das Streuverhalten von metastabilen Helium ( $2^3S$ )-Atomen und Natrium-Atomen im Grundzustand an einer absorbierenden Kugel im Nanometerbereich an Hand des Wirkungsquerschnitts untersucht. Zwei verschiedene Shape-Funktionen (3.187) wurden zur Beschreibung der Form des Atom-Kugel-Potentials in der Übergangszone vom nicht-retardierten van der Waals-Regime und dem hoch retardierten Casimir-Regime verwendet und mit den entsprechenden homogenen Potentials verglichen. Durch eine Variation von  $R_K$  können die charakteristischen Längen so verändert werden, dass sie entweder im nicht-retardierten van der Waals-Regime, im hoch retardierten Casimir-Regime oder in der Übergangszone dazwischen liegen. Somit bietet die Streuung ultrakalter Atome an Nanokugeln eine transparente, empfindliche und flexible Möglichkeit, um Atom-Oberflächen-Potentials zu untersuchen.



# Kapitel 4

## Streutheorie in zwei Dimensionen

In diesem Abschnitt erweitern wir die Ergebnisse aus Kapitel 3 auf den Fall der Streuung in zwei Dimensionen. Das Interesse an einer zwei-dimensionalen Streutheorie wurde durch Experimente geweckt, bei denen Atome an einer Oberfläche adsorbiert werden [97, 98]. Eine zwei-dimensionale Theorie ist jedoch nicht nur relevant für ebene Probleme, sondern auch für drei-dimensionale Systeme, die translationsinvariant in einer der drei Dimensionen sind. Dies liegt z.B. bei der Streuung von Atomen oder Molekülen an einem Draht oder Nanoröhrchen vor. Das Bewußtsein für derartige Problemstellungen wurde kürzlich durch die Untersuchung der Wechselwirkung eines neutralen Atoms oder Moleküls mit einem elektrisch geladenen Draht oder Nanoröhrchen [99, 100] geweckt, bei der die Wechselwirkung für große Abstände durch ein stark attraktives  $-1/r^2$ -Potential beschrieben wird. Für einen neutralen Draht oder ein Nanoröhrchen fällt das Potential für große Abstände schneller ab. Die Stärke des Zentrifugalpotentials ist in zwei Dimensionen durch  $m^2 - 1/4$ ,  $m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$  gegeben und verschwindet nicht – selbst für die  $s$ -Wellenstreuung ( $m = 0$ ), bei der das Potential attraktiv ist [101, 102]. Dieser attraktive Zentrifugalterm in der radialen  $s$ -Wellen Schrödinger-Gleichung ist für sich alleine noch zu schwach, um eine Dipolserie auszubilden [72], beeinflusst aber stark das Schwellenverhalten der  $s$ -Wellenstreuphase und den zwei-dimensionalen Wirkungsquerschnitt [103–105]. Die Konzepte “Streulänge” und “effektive Reichweite” aus der drei-dimensionalen Streutheorie können für Potentiale mit einer endlichen Reichweite auch auf die zwei-dimensionale Theorie übertragen werden [31]. Die Entwicklung des Kotangens der Streuphase divergiert in diesem Fall logarithmisch im Gegensatz zu der Entwicklung (3.52). Ebenso kann für länger-reichweitige Potentiale eine Theorie für diese Größen hergeleitet werden.

Hierfür gehen wir zunächst auf die wesentlichen Eigenschaften und Unterschiede des Schwellenverhaltens (vor allem in der  $s$ -Wellenstreuung) der zwei-dimensionalen Streutheorie im Gegensatz zum drei-dimensionalen Fall ein (Abschnitt 4.1). Wir beschreiben, wie eine Streulänge und effektive Reichweite definiert werden können (Abschnitt 4.2), sowohl für die Streuung an repulsiven Potentialen (Abschnitt 4.2.1), als auch Quantenreflexion an attraktiven Potentialen (Abschnitt 4.2.2). In beiden Fällen wird das Schwellenverhalten nur durch wenige charakteristische Parameter des Potentialschwanzes beschrieben: durch die reelle (bzw. komplexe) Streulänge  $a$  (bzw.  $\alpha$ ) und die reelle (bzw. komplexe) effektive Reichweite  $r_{\text{eff},0}$  (bzw.  $\mathbf{r}_{\text{eff},0}$ ), welche die führenden Terme der Streuphase  $\delta_{m=0}(k)$  (bzw.  $\mathbf{\delta}_{m=0}(k)$ ) bestimmen. In Abschnitt 4.2.2 betrachten wir Potentiale mit einem homogenen Potentialschwanz proportional zu  $1/r^\alpha$  und berechnen analytisch sowohl die reelle als auch komplexe Streulänge und effektive Reichweite. Der Sonderfall  $\alpha = 4$  wird in Abschnitt 4.2.3.3 behandelt, in dem wir eine modifizierte effective-range Entwicklung mit Hilfe der Mathieu-Funktionen herleiten. Abschließend bestimmen wir in Abschnitt 4.3 das Schwellenverhalten der Streuphase für beliebige  $m > 0$  für die homogenen Potentiale  $\pm 1/r^\alpha$  durch eine Verallgemeinerung der Jost-

Theorie aus Abschnitt 3.4. Die Ergebnisse in Abschnitt 4.3 sind sehr allgemein gehalten und beschränken sich nicht nur auf ganz- bzw. halbzahlige Werte von  $m$ .

## 4.1 Grundlagen

Im Allgemeinen bestehen sehr viele Analogien zwischen der drei-dimensionalen Streutheorie und den jeweiligen Ausdrücken in zwei Dimensionen, beide Fälle unterscheiden sich jedoch sehr im Schwellenverhalten der  $s$ -Wellenstreuung. Wieder ist die Schrödinger-Gleichung (3.3) zu lösen (unter der Annahme, dass die Masse des Targets sehr viel größer ist als die des zu streuenden Teilchens)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}}\Delta + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r}) = 0. \quad (4.1)$$

Wir suchen jetzt nach Lösungen, welche asymptotisch (für  $r \rightarrow \infty$ ) aus einer einlaufenden ebenen Welle und einer auslaufenden Kreiswelle bestehen:

$$\psi(\vec{r}) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \exp(ikz) + f(\theta) \frac{\exp(ikr)}{\sqrt{r}} = \psi_{\text{ein}}^{2\text{D}} + \psi_{\text{aus}}^{2\text{D}}. \quad (4.2)$$

$f(\theta)$  ist die Streuamplitude, welche die Streuung im Winkel  $\theta$  bestimmt, und besitzt die physikalische Dimension der Wurzel einer Länge.

Für ein Teilchen der Masse  $\mathcal{M}$  und der Energie  $E = \hbar^2 k^2 / (2\mathcal{M})$ , das sich in einer Ebene unter dem Einfluss eines zirkular-symmetrischen Potentials  $V(r)$  bewegt, können wir analog zu Gleichung (3.7) die Lösung  $\psi(\vec{r})$  entwickeln

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{u_m(r)}{\sqrt{r}} e^{im\theta}, \quad (4.3)$$

wobei  $u_m$  eine Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung

$$\frac{d^2 u_m}{dr^2} + \left[ k^2 - \frac{m^2 - 1/4}{r^2} - \frac{2\mathcal{M}}{\hbar^2} V(r) \right] u_m(r) = 0, \quad (4.4)$$

ist, die unabhängig vom Vorzeichen der Drehimpulsquantenzahl  $m$  ist. Gleichung (4.4) ist (formal) identisch mit der radialen Schrödinger-Gleichung in drei Dimensionen (3.8), wenn wir  $l(l+1)$  für  $m^2 - \frac{1}{4}$  schreiben, also wenn wir  $|m|$  als  $l + \frac{1}{2}$  interpretieren. Die reguläre Lösung  $c_m$  und die irreguläre Lösung  $s_m$  der freien Lösung ( $V \equiv 0$ ) sind zylindrische Bessel-Funktionen [75],

$$c_m(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2}kr} J_{|m|}(kr), \quad s_m(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2}kr} Y_{|m|}(kr), \quad (4.5)$$

deren asymptotisches Verhalten für große Abstände durch

$$c_m(kr) \stackrel{kr \rightarrow \infty}{\sim} \cos\left(kr - |m|\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right), \quad (4.6a)$$

$$s_m(kr) \stackrel{kr \rightarrow \infty}{\sim} \sin\left(kr - |m|\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right), \quad (4.6b)$$

und für kleine Abstände durch

$$c_m(kr) \stackrel{kr \rightarrow 0}{\sim} \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(|m|+1)} \left(\frac{kr}{2}\right)^{\frac{1}{2}+|m|}, \quad (4.7a)$$

$$s_{m \neq 0}(kr) \stackrel{kr \rightarrow 0}{\sim} -\frac{\Gamma(|m|)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{kr}{2}\right)^{\frac{1}{2}-|m|}, \quad (4.7b)$$

$$s_{m=0}(kr) \stackrel{kr \rightarrow 0}{\sim} \sqrt{\frac{2}{\pi}kr} \left[ \ln\left(\frac{kr}{2}\right) + \gamma_E \right], \quad (4.7c)$$

gegeben ist. Die reguläre Lösung  $u_{\text{reg},m}^{(k)}$  aus (4.4) erfüllt die Bedingung  $u_{\text{reg},m}^{(k)}(0) = 0$  und ist bei großen Abständen eine Überlagerung von  $c_m$  und  $s_m$ ,

$$\begin{aligned} u_{\text{reg},m}^{(k)} &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\propto} c_m \cos \delta_m(k) - s_m \sin \delta_m(k) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\rightarrow} \cos \left( kr - |m| \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4} + \delta_m(k) \right) \\ &\propto e^{-ikr} - (-1)^{|m|} i e^{2i\delta_m(k)} e^{+ikr} . \end{aligned} \quad (4.8)$$

Entwickeln wir die einlaufende Welle  $\psi_{\text{ein}}^{2\text{D}}$  nach Bessel-Funktionen,

$$\psi_{\text{ein}}^{2\text{D}} = e^{ikz} = \sum_{m=-\infty}^{m=+\infty} i^m J_m(kr) e^{im\theta} \quad (4.9)$$

und die Amplitude  $f(\theta)$  nach den Partialwellenamplituden  $f_m$

$$f(\theta) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} f_m e^{im\theta} , \quad (4.10)$$

können wir das asymptotische Verhalten von  $u_{\text{reg},m}^{(k)}$  durch  $f_m$  ausdrücken:

$$u_{\text{reg},m}^{(k)} \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{\sqrt{2i\pi k}} \left( \left( 1 + \sqrt{2i\pi k} f_m \right) e^{ikr} + i(-1)^m e^{-ikr} \right) . \quad (4.11)$$

Ein Vergleich mit Gleichung (4.8) stellt den Zusammenhang zwischen  $\delta_m(k)$  und  $f_m$  her und definiert die Streumatrix  $S_m(k)$  in der Partialwelle  $m$  in zwei Dimensionen:

$$f_m = \frac{1}{\sqrt{2i\pi k}} (e^{2i\delta_m(k)} - 1) = \frac{1}{\sqrt{2i\pi k}} (S_m(k) - 1) , \quad S_m(k) = e^{2i\delta_m(k)} . \quad (4.12)$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/d\theta$  und der totale (elastische) Wirkungsquerschnitt  $\sigma$  sind Längen, die durch

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = |f(\theta)|^2 = \sum_{m,m'} f_m^* f_{m'} e^{i(m'-m)\theta} , \quad (4.13a)$$

$$\sigma = \int_0^{2\pi} \frac{d\sigma}{d\theta} d\theta = 2\pi \sum_{m=-\infty}^{+\infty} |f_m|^2 = \frac{4}{k} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \sin^2 \delta_m(k) \quad (4.13b)$$

bestimmt werden. Das optische Theorem in zwei Dimensionen lautet:

$$\sigma = \sqrt{\frac{\pi}{k}} [\Im(f(\theta=0)) - \Re(f(\theta=0))] . \quad (4.14)$$

## 4.2 Streulängen und effective-range Entwicklung in zwei Dimensionen

### 4.2.1 $s$ -Wellenstreuung an repulsiven Potentialen

Ist das Potential nicht zu langreichweitig, dann wird das Schwellenverhalten von  $u_{\text{reg},m}^{(k)}$  aus (4.7) für  $|m| > 0$  und einem großen Abstand  $r$  (d.h.  $r \rightarrow \infty$  aber  $kr \rightarrow 0$ ) durch

$$u_{\text{reg},m}^{(k)} \stackrel{kr \rightarrow 0}{\propto} \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(|m|+1)} \left(\frac{kr}{2}\right)^{\frac{1}{2}+|m|} \cos \delta_m(k) + \frac{\Gamma(|m|)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{kr}{2}\right)^{\frac{1}{2}-|m|} \sin \delta_m(k) \quad (4.15)$$

beschrieben, während für  $m = 0$  gilt:

$$u_{\text{reg},m=0}^{(k)} \stackrel{kr \rightarrow 0}{\propto} \sqrt{\frac{kr}{2}} \cos \delta_{m=0}(k) - \sqrt{\frac{2}{\pi}kr} \left[ \ln \left(\frac{kr}{2}\right) + \gamma_E \right] \sin \delta_{m=0}(k). \quad (4.16)$$

An der Schwelle,  $k = 0$ , sind die zwei linear unabhängigen Lösungen der freien Gleichung ( $V(r) \equiv 0$ ) proportional zu  $r^{\frac{1}{2}+|m|}$  und  $r^{\frac{1}{2}-|m|}$  für  $|m| > 0$ , bzw.  $\sqrt{r}$  und  $\sqrt{r} \times \ln r$  für  $m = 0$ . Im Grenzwert  $k \rightarrow 0$  müssen die zwei Ausdrücke (4.15) und (4.16) in eine  $k$ -unabhängige Linearkombination proportional zu diesen Schwellenlösungen übergehen. Dies ist nur dann möglich, wenn die  $k$ -Abhängigkeit von  $\cos \delta_m(k)$  und  $\sin \delta_m(k)$  die Differenz der  $k$ -Abhängigkeit kompensiert, die über das Argument  $(kr/2)$  in (4.15) bzw. (4.16) eingeht. Für  $|m| > 0$  wird dies für Potentiale, die schneller abfallen als  $1/r^{2|m|+2}$ , durch

$$\tan \delta_m(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \pm \frac{\pi}{\Gamma(|m|)\Gamma(|m|+1)} \left(\frac{ka_m}{2}\right)^{2|m|} \quad (4.17)$$

erreicht, wogegen für  $m = 0$  von  $\cot \delta_{m=0}(k)$  verlangt werden muss:

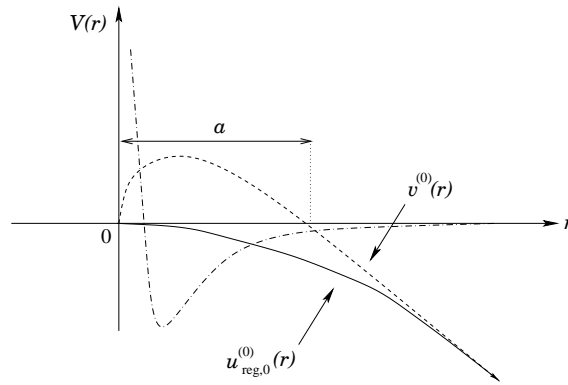
$$\cot \delta_{m=0}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{2}{\pi} \left[ \ln \left(\frac{ka}{2}\right) + \gamma_E \right]. \quad (4.18)$$

Insgesamt verhält sich die richtig normierte Lösung  $u_{\text{reg},m}^{(0)}$  von (4.4) bei der Energie  $E = 0$  für große Abstände  $r$  wie

$$u_{\text{reg},m \neq 0}^{(0)}(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{r} \left[ \left(\frac{r}{a_m}\right)^{|m|} \pm \left(\frac{r}{a_m}\right)^{-|m|} \right], \quad (4.19a)$$

$$u_{\text{reg},m=0}^{(0)}(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} -\sqrt{r} \ln \left(\frac{r}{a}\right). \quad (4.19b)$$

Die Konstanten  $a_m$  in (4.17) und  $a$  in (4.18) definieren eine charakteristische Längenskala für das führende Schwellenverhalten der Streuphase  $\delta_m(k)$  und können auch als die jeweilige Streulänge bezeichnet werden. Dies trifft im Speziellen auf die  $s$ -Wellenstreulänge  $a$  zu, auch wenn der führende Beitrag von  $\delta_{m=0}(k)$  einen Logarithmus enthält und sich wesentlich vom Verhalten der  $s$ -Wellenstreuphase in drei Dimensionen unterscheidet (vgl. Gleichung (3.172)). Die Definition der  $s$ -Wellenstreulänge gemäß den Gleichungen (4.18) und (4.19) wurde bereits von Verhaar *et al.* [31] formuliert. Sie hat den Vorteil, dass die rechte Seite von (4.18) *alle* Beiträge der Ordnung  $k^0$  enthält und dass alle weiteren Beiträge von höherer Ordnung in  $k$  sind (d.h. sie sind nicht nur durch einen logarithmischen Faktor voneinander getrennt). Alternative Definitionen der  $s$ -Wellenstreulänge wurden bereits vorgeschlagen [106], führen aber zu einem zusätzlichen, nicht notwendigen Term der Ordnung  $k^0$ . Die Definition (4.19b) der  $s$ -Wellenstreulänge ähnelt der Definition von  $a_0$  in drei Dimensionen



**Abbildung 4.1:** Geometrische Deutung der  $s$ -Wellenstreulänge  $a$  in zwei Dimensionen. Sie ist die erste, nicht-triviale Nullstelle der asymptotischen Lösung (4.20) der freien Schrödinger-Gleichung.

(vgl. Abbildung 3.3) darin, dass sie auf eindeutige Weise durch die nichttriviale Nullstelle derjenigen Schwellenlösung  $v^{(0)}$  der freien Schrödinger-Gleichung definiert wird, welche das gleiche asymptotische Verhalten (4.19) wie die Schwellenlösung von (4.4) besitzt. In drei Dimensionen ist nach Gleichung (3.72)  $v^{(0)}(r) \propto 1 - r/a$ , während in zwei Dimensionen  $v^{(0)}(r)$  durch

$$v^{(0)}(r) = -\sqrt{r} \ln\left(\frac{r}{a}\right) \quad (4.20)$$

beschrieben wird. Die Streulänge  $a$  ist für jedes Potential, das asymptotisch schneller abfällt als  $1/r^2$ , wohldefiniert und immer positiv. Abbildung 4.1 zeigt die geometrische Deutung der  $s$ -Wellenstreulänge  $a$  in zwei Dimensionen.

Die logarithmische Abhängigkeit der Streuphase von der Wellenzahl  $k$  auf der rechten Seite von (4.18) ist so charakteristisch für  $s$ -Wellen in zwei Dimensionen, dass wir die logarithmische Funktion

$$L(x) \stackrel{\text{Def.}}{=} \ln\left(\frac{x}{2}\right) + \gamma_{\text{E}} \quad (4.21)$$

eingeführen. Das Schwellenverhalten von Größen wie z.B. der  $s$ -Wellenstreuphase wird durch den logarithmischen Term dominiert, da der Logarithmus für verschwindende Argumente  $L(x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} -\infty$  divergiert. Zum Vergleich hierzu haben positive Potenzen  $x^p$  von  $x$  eine höhere Ordnung als  $L(x)$  für  $x \rightarrow 0$ . Die Nullstelle  $x_0$  von  $L(x)$  liegt bei

$$x_0 = 2 e^{-\gamma_{\text{E}}} \approx 1.1229190, \quad L(x_0) = 0. \quad (4.22)$$

Für diese dimensionslose Zahl  $x_0$  kann  $x^p$  nicht mehr länger als klein im Vergleich zu  $L(x)$  angenommen werden. Sie beschreibt eine natürliche obere Grenze für die Dominanz der führenden logarithmischen Terme.

Durch obige Eigenschaft von  $L(x)$  dominiert der  $s$ -Wellenbeitrag sowohl den differentiellen als auch den totalen Wirkungsquerschnitt, die beide für  $k \rightarrow 0$  “nahezu” wie  $1/k$  divergieren. “Nahezu” bedeutet bis auf einen logarithmischen Faktor:

$$\frac{d\sigma}{d\theta} \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} |f_{m=0}|^2, \quad \sigma \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} 2\pi |f_{m=0}|^2 = \frac{4}{k} \sin^2 \delta_{m=0}(k) = \frac{4/k}{1 + \cot^2 \delta_{m=0}(k)}. \quad (4.23)$$

Wie bereits erwähnt, kann eine Streulänge  $a$  bzw.  $a_m$  nur dann definiert werden, wenn das Potential schneller abfällt als  $1/r^{2|m|+2}$ . Erinnerung wir uns an den (formalen) Zusammenhang

$l = m - 1/2$ , so folgt diese Behauptung direkt aus den Aussagen von Blatt und Jackson für den drei-dimensionalen Fall [25] und kann am Beispiel der homogenen Potentiale

$$V(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \pm \frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}} \frac{\beta_\alpha^{\alpha-2}}{r^\alpha}, \quad \alpha > 2, \quad (4.24)$$

verstanden werden. Die Schwellenlösung von (4.4) ist für große Abstände  $r$  im Wesentlichen eine Überlagerung von Bessel-Funktionen der Ordnung  $\mu = 2|m|/(\alpha - 2)$  und dem Argument  $z = 2(\beta_\alpha/r)^{(\alpha-2)/2}/(\alpha - 2)$  [92]. Für einen attraktiven Potentialschwanz sind die zwei linear unabhängigen Lösungen für große Abstände (und nicht ganzzahlige  $\mu$ ),  $\sqrt{r}J_\mu(z)$  und  $\sqrt{r}J_{-\mu}(z)$  bzw.  $\sqrt{r}Y_\mu(z)$  und  $\sqrt{r}Y_{-\mu}(z)$  (wenn  $\mu$  ganzzahlig ist). Für große  $r$  (kleine  $z$ ) kommt der führende Beitrag zu der Superposition von  $\sqrt{r}J_\mu(z)$  und  $\sqrt{r}J_{-\mu}(z)$  (bzw.  $\sqrt{r}Y_\mu(z)$ ) aus dem Beitrag  $J_{-\mu}$  (bzw.  $Y_\mu$ ) und ist proportional zu  $r^{\frac{1}{2}+|m|}$ . Der nächsthöhere Term enthält einen zusätzlichen Faktor  $(z/2)^2 \propto (\beta_\alpha/r)^{\alpha-2}$  und ist proportional zu  $r^{\frac{1}{2}+|m|+2-\alpha}$ ; dieser Beitrag muss eine schwächere  $r$ -Abhängigkeit haben als der führende Beitrag von  $\sqrt{r}J_\mu(z)$ , der proportional zu  $r^{\frac{1}{2}-|m|}$  ist, vgl. (4.19). Die Gleichungen (4.17) und (4.18) sind nur dann gültig, wenn  $\alpha - 2 > 2|m|$  ist. Die gleichen Argumente gelten auch für repulsive Potentialschwänze; die Bessel-Funktionen  $J_\mu$  und  $Y_\mu$  müssen durch  $I_\mu$  und  $K_\mu$  ersetzt werden.

Der nächsthöhere Beitrag zum differentiellen Wirkungsquerschnitt (4.13a) ist von der Ordnung  $k$  und stammt vom  $p$ -Wellenbeitrag ( $|m| = 1$ ) zur Streuamplitude und der nächsthöheren Ordnung in der  $s$ -Wellenstreuphase. Den  $s$ -Wellenanteil bestimmen wir ähnlich wie in Abschnitt 3.3 aus einer effective-range Theorie. Wie in Gleichung (3.72) beginnen wir mit der richtig normierten regulären Lösung  $u_{\text{reg}}^{(k)}$  von (4.4), die sich asymptotisch wie<sup>1</sup>

$$u_{\text{reg}}^{(k)}(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\pi}{2} \sqrt{r} [J_0(kr) \cot \delta_{m=0}(k) - Y_0(kr)], \quad (4.25)$$

verhält und mit der entsprechenden freien Lösung  $v^{(k)}$ , welche die gleiche Asymptotik aufweist:

$$v^{(k)}(r) = \frac{\pi}{2} \sqrt{r} [J_0(kr) \cot \delta_{m=0}(k) - Y_0(kr)]. \quad (4.26)$$

Aus der Schrödinger-Gleichung (4.4) für  $m = 0$ , ausgewertet an der Schwelle bzw. bei einer endlichen Wellenzahl  $k$ , mit und ohne Potential  $V$  (vgl. (3.59)), erhalten wir

$$\left[ u_{\text{reg}}^{(0)} u_{\text{reg}}^{(k)'} - u_{\text{reg}}^{(0)'} u_{\text{reg}}^{(k)} - (v^{(0)} v^{(k)'} - v^{(0)'} v^{(k)}) \right]_0^\infty = k^2 I(k), \quad (4.27)$$

mit

$$I(k) = \int_0^\infty [v^{(0)}(r) v^{(k)}(r) - u_{\text{reg}}^{(0)}(r) u_{\text{reg}}^{(k)}(r)] dr. \quad (4.28)$$

Auf der linken Seite von (4.27) verschwindet der Beitrag für  $r \rightarrow \infty$ , da die Lösungen  $u$  und  $v$  die gleichen Randbedingungen erfüllen. Für  $r \rightarrow 0$  verschwinden die Beiträge der  $u$ 's, also der regulären Lösung von (4.4), auf Grund ihrer Randbedingungen und die Beiträge der  $v$ 's folgen aus (4.26) für  $r \rightarrow 0$ :

$$v^{(0)} v^{(k)'} - v^{(0)'} v^{(k)} \stackrel{r \rightarrow 0}{\sim} \frac{\pi}{2} \cot \delta_{m=0}(k) - L(ka). \quad (4.29)$$

$L(x)$  ist die logarithmische Funktion, die in Gleichung (4.21) definiert wurde. Der führende Beitrag von  $\cot \delta_{m=0}(k)$  bis einschließlich der Ordnung  $\mathcal{O}(k^2)$  lautet:

$$\cot \delta_{m=0}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{2}{\pi} \left[ L(ka) + \frac{(k r_{\text{eff},0})^2}{2} \right], \quad (4.30)$$

<sup>1</sup>Wir verzichten auf den Index 0 bei den Wellenfunktionen  $u$  und  $v$ , solange wir uns offensichtlich auf  $s$ -Wellen beziehen.

und beinhaltet einen “effective-range Term”

$$r_{\text{eff},0}^2 = 2 \lim_{k \rightarrow 0} I(k) = 2 \int_0^\infty \left[ (v^{(0)}(r))^2 - (u_{\text{reg}}^{(0)}(r))^2 \right] dr, \quad (4.31)$$

wie er schon von Verhaar *et al.* [31] formuliert wurde.<sup>2</sup>

Das Integral in (4.31) konvergiert nur für  $\alpha > 4$  gegen einen wohldefinierten Grenzwert. Dies zeigen wir wieder mit den homogenen Potentialen (4.24). Die Lösung  $u_{\text{reg}}^{(0)}$  von (4.4) bei  $E = 0$  und  $m = 0$  beschreibt asymptotisch eine Überlagerung von Bessel-Funktionen der Ordnung Null und dem Argument  $z = 2(\beta_\alpha/r)^{(\alpha-2)/2}/(\alpha-2)$ . Der führende Beitrag für große  $r$  (kleine  $z$ ) ist identisch zu  $v^{(0)} = -\sqrt{r} \ln(r/a)$ , der nächsthöhere Beitrag enthält einen zusätzlichen Faktor proportional zu  $z^2$ , also zu  $r^{-(\alpha-2)}$ . Insgesamt ist der führende Beitrag von  $(v^{(0)})^2 - (u_{\text{reg}}^{(0)})^2$  proportional zu  $r^{(3-\alpha)} \ln(r/a)^2$  und das Integral auf der rechten Seite von (4.31) konvergiert für  $\alpha > 4$ .

## 4.2.2 Quantenreflexion

Wird das effektive Potential für die  $s$ -Wellenstreuung nicht nur durch den attraktiven Zentrifugalterm  $-1/(4r^2)$  beschrieben, sondern enthält noch zusätzlich ein attraktives Potential, das singulärer als  $-1/r^2$  ist, wird die Bewegung wie im ein- bzw. drei-dimensionalen Fall für kleine Abstände klassisch. Die WKB-Lösungen werden für  $r \rightarrow 0$  exakt und wir können Quantenreflexion durch die Randbedingungen (2.34) beschreiben.

Zur Bestimmung von Quantenreflexionsamplituden in zwei Dimensionen untersuchen wir die komplexen Lösungen  $\mathbf{u}^{(k)}(r)$  der radialen Schrödinger-Gleichung (mit dem reellen Potential  $V_{\text{tail}}$ ), die für kleine Abstände  $r$  die einlaufenden Randbedingungen (2.34b) erfüllen und sich asymptotisch (für große  $r$ ) wie

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{(k)}(r) &\sim \frac{\pi}{2} \sqrt{r} [J_0(kr) \cot \delta_{m=0}(k) - Y_0(kr)] \\ &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\propto} e^{-ikr} + R_{m=0}(k) e^{+ikr} \end{aligned} \quad (4.32)$$

verhalten. Diese Lösung hat die gleiche Gestalt wie die Lösungen (4.8) und (4.25), mit dem Unterschied, dass die Phasenverschiebung  $\delta_{m=0}(k)$  jetzt eine komplexe Größe und die  $S$ -Matrix  $S_{m=0}(k) = iR_{m=0}(k) = \exp(2i\delta_{m=0}(k))$  nicht mehr unitär ist,  $|S_{m=0}(k)| = |R_{m=0}(k)| \leq 1$ . Ähnlich zum drei-dimensionalen Fall (vgl. (3.22)) kann die Quantenreflexionsamplitude  $R_{m=0}(k)$  aus der komplexen Streuphase  $\delta_{m=0}(k)$  über

$$i \cot \delta_{m=0}(k) = \frac{1 + iR_{m=0}(k)}{1 - iR_{m=0}(k)}, \quad R_{m=0}(k) = -ie^{2i\delta_{m=0}(k)} = -i \frac{\cot \delta_{m=0}(k) + i}{\cot \delta_{m=0}(k) - i} \quad (4.33)$$

berechnet werden. An der Schwelle nimmt die komplexe Wellenfunktion (4.32) die  $k$ -unabhängige Form  $\mathbf{u}^{(0)}(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} -\sqrt{r} \ln(r/\mathbf{a})$  an und wird durch eine (komplexe) Streulänge  $\mathbf{a}$  charakterisiert. Basierend auf den Aussagen aus Abschnitt 4.2.1 können wir eine effective-range Theorie herleiten, deren Ausgangspunkt die Wellenfunktionen (4.32) und die entsprechenden Lösungen der freien Gleichung sind:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^{(k)}(r) &= \frac{\pi}{2} \sqrt{r} [J_0(kr) \cot \delta_{m=0}(k) - Y_0(kr)], \\ \mathbf{v}^{(0)}(r) &= -\sqrt{r} \ln\left(\frac{r}{\mathbf{a}}\right) = -\sqrt{r} \ln\left(\frac{r}{|\mathbf{a}|}\right) + i \arg(\mathbf{a}) \sqrt{r}. \end{aligned} \quad (4.34)$$

<sup>2</sup>Nach dieser Definition kann  $r_{\text{eff},0}^2$  auch negativ sein.

Dies führt zu einer effektive-range Entwicklung der komplexen Streuphase  $\delta_{m=0}(k)$ ,

$$\cot \delta_{m=0}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{2}{\pi} \left[ \ln \left( \frac{k\alpha}{2} \right) + \gamma_E + \frac{1}{2}(k \mathbf{r}_{\text{eff},0})^2 \right], \quad (4.35)$$

mit der komplexen effektiven Reichweite  $\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2$ , definiert durch

$$\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2 = 2 \int_0^\infty \left[ (\mathbf{v}^{(0)}(r))^2 - (\mathbf{u}^{(0)}(r))^2 \right] dr. \quad (4.36)$$

$\mathbf{u}^{(0)}(r)$  ist die Schwellenlösung der Schrödinger-Gleichung (mit dem attraktiven singulären Potential), die asymptotisch mit  $\mathbf{v}^{(0)}(r)$  aus (4.34) übereinstimmt.

Die komplexe Streulänge  $\alpha$  ist von der Amplitude und der Phase der zwei linear unabhängigen reellen Lösungen

$$u^{(0)}(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{r}, \quad w_\lambda^{(0)}(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} -\sqrt{r} \ln \left( \frac{r}{\lambda} \right) \quad (4.37)$$

abhängig, wobei  $\lambda$  eine noch zu bestimmende Länge ist, die sicherstellt, dass das Argument des Logarithmus dimensionslos ist. Bei kleinen Abständen, bei denen die WKB-Approximation gut ist, kann sowohl  $u^{(0)}$  als auch  $w_\lambda^{(0)}(r)$  als WKB-Wellen mit den reellen Amplituden  $D_0$ ,  $B_0$  geschrieben werden:

$$u^{(0)}(r) = \frac{D_0}{\sqrt{p_0(r)}} \cos \left[ I_{\text{tail}}^{(0)}(r) \right], \quad w_\lambda^{(0)}(r) = \frac{B_0}{\sqrt{p_0(r)}} \cos \left[ J_{\text{tail}}^{(0)}(r) \right]. \quad (4.38)$$

Hier ist  $I_{\text{tail}}^{(0)}(r)$  im Wesentlichen das Wirkungsintegral auf der Schwelle mit dem lokalen klassischen Impuls,  $p_0 = \sqrt{\hbar^2/(4r^2) - 2\mathcal{M}V_{\text{tail}}(r)}$ ,

$$I_{\text{tail}}^{(0)}(r) = \frac{1}{\hbar} \int_r^{r_O} p_0(r') dr' - \Phi(r_O). \quad (4.39)$$

Das Integral kann ohne zu divergieren nur bis zu einer endlichen oberen Grenze  $r_O$  definiert werden und wird durch die Subtraktion einer Phase  $\Phi(r_O)$  regularisiert, die im Grenzwert  $r_O \rightarrow \infty$  in der gleichen Weise wie das Integral divergieren muss. Für ausreichend große  $r_O$  muss  $I_{\text{tail}}^{(0)}(r)$  unabhängig von  $r_O$  sein und seine Phase ist so definiert, dass die WKB-Darstellung (4.38) von  $u^{(0)}(r)$  mit der exakten Wellenfunktion für  $r \rightarrow 0$  übereinstimmt. Der Integrand  $J_{\text{tail}}^{(0)}(r)$ , der die  $r$ -Abhängigkeit von  $w_\lambda^{(0)}(r)$  in der WKB-Region beschreibt, unterscheidet sich von  $I_{\text{tail}}^{(0)}(r)$  nur durch eine  $r$ -unabhängige Phase, die von der Länge  $\lambda$  abhängt. Diese Phase gibt die relative Gewichtung von  $\sqrt{r}$  und  $\sqrt{r} \ln(r)$  der Beiträge in  $w_\lambda^{(0)}(r)$  an. Die Länge  $\lambda$  lässt sich durch die Forderung definieren, dass  $w_\lambda^{(0)}(r)$  relativ zu der eindeutig definierten Wellenfunktion  $u^{(0)}(r)$  für  $r \rightarrow 0$  um  $\frac{\pi}{2}$  verschoben ist:

$$J_{\text{tail}}^{(0)}(r) \stackrel{r \rightarrow 0}{\sim} I_{\text{tail}}^{(0)}(r) - \frac{\pi}{2} \Rightarrow w_\lambda^{(0)}(r) \stackrel{r \rightarrow 0}{\sim} \frac{B_0}{\sqrt{p_0(r)}} \sin \left[ I_{\text{tail}}^{(0)}(r) \right]. \quad (4.40)$$

Die Linearkombination von  $u^{(0)}(r)$  und  $w_\lambda^{(0)}(r)$ , die einlaufende Randbedingungen für  $r \rightarrow 0$  beschreibt, lautet

$$\mathbf{u}^{(0)}(r) \propto u^{(0)}(r) + i \frac{D_0}{B_0} w_\lambda^{(0)}(r) \stackrel{r \rightarrow 0}{\sim} \frac{D_0}{\sqrt{p_0(r)}} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_r^{r_O} p(r') dr' - \Phi(r_O) \right], \quad (4.41)$$

und ein Vergleich der Asymptotik (4.34) (für  $r \rightarrow \infty$ ) von  $\mathbf{u}^{(0)}(r)$  zeigt:

$$\lambda = |\alpha|, \quad \arg(\alpha) = -\frac{B_0}{D_0}. \quad (4.42)$$



Mit der Definition (4.21) der reellen Logarithmusfunktion  $L(x)$  kann Gleichung (4.35) als

$$\cot \delta_{m=0}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{2}{\pi} \left[ L(k|\mathbf{a}|) + \frac{k^2}{2} \Re [\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2] + i \left( \arg(\mathbf{a}) + \frac{k^2}{2} \Im [\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2] \right) \right] \quad (4.43)$$

geschrieben werden und ergibt, eingesetzt in (4.33), folgenden Ausdruck  $R_{m=0}(k)$ :

$$R_{m=0}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -i \left[ 1 + \frac{i\pi}{L(k|\mathbf{a}|) + \frac{1}{2}k^2 \Re [\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2] + i \left( \arg(\mathbf{a}) - \frac{\pi}{2} + \frac{1}{2}k^2 \Im [\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2] \right)} \right]. \quad (4.44)$$

### 4.2.3 Anwendung an den homogenen Potentialen $\pm 1/r^\alpha$

#### 4.2.3.1 $s$ -Wellenstreuung an repulsiven Potentialen

Für ein homogenes repulsives Potential

$$V(r) = V_\alpha^{\text{rep}}(r) = \frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}} \frac{(\beta_\alpha)^{\alpha-2}}{r^\alpha}, \quad \alpha > 2, \quad (4.45)$$

ist die Lösung von (4.4) (für  $m = 0$ ) bei der Energie  $E = 0$  eine modifizierte Bessel-Funktion mit dem Argument  $z$  und der Ordnung  $\nu$

$$z = 2\nu \left( \frac{\beta_\alpha}{r} \right)^{1/(2\nu)}, \quad \nu = \frac{1}{\alpha - 2}, \quad (4.46)$$

nämlich

$$u_{\text{reg}}^{(0)}(r) = -2\nu\sqrt{r}K_0(z). \quad (4.47)$$

Für große  $r$  (kleine  $z$ ) nimmt diese die Form

$$u_{\text{reg}}^{(0)}(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} -\sqrt{r} \left[ \ln \left( \frac{r}{\beta_\alpha} \right) - 2\nu [\gamma_E + \ln(\nu)] \right] \quad (4.48)$$

an. Ein Vergleich mit (4.19) bestimmt die Streulänge  $a^{\text{rep}}$  für das repulsive homogene Potential (4.45):

$$a^{\text{rep}} = \nu^{2\nu} \exp(2\nu\gamma_E) \beta_\alpha. \quad (4.49)$$

Der führende Beitrag zur  $s$ -Wellenstreuphase folgt aus (4.18),

$$\cot \delta_{m=0}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{2}{\pi} L(k a^{\text{rep}}), \quad (4.50)$$

und hängt vom Logarithmus  $L(x)$  aus Gleichung (4.21) ab, dessen Nullstelle (vgl. (4.22)) bei

$$k a^{\text{rep}} = x_0 = 2 e^{-\gamma_E} \implies k \beta_\alpha = \frac{2 e^{-(1+2\nu)\gamma_E}}{\nu^{2\nu}} \stackrel{\text{Def.}}{=} x_\alpha \quad (4.51)$$

liegt.

Die effektive Reichweite  $(r_{\text{eff},0}^{\text{rep}})^2$  folgt aus Gleichung (4.31) und den Wellenfunktionen  $u_{\text{reg}}^{(0)}(r)$  bzw.  $v^{(0)}(r) = -\sqrt{r} \ln(r/a^{\text{rep}})$ . Das hierbei auftretende Integral der Form  $\int r K_0^2(z) dr$  lässt sich analytisch mit Hilfe der Meijer G-Funktion  $G_{m,n}^{p,q}$  lösen,

$$\int r K_0^2(z) dr = \frac{\sqrt{\pi}}{4} G_{12}^{31} \left( z, \frac{1}{2} \left| \begin{array}{c} 1, -4\nu \\ -\frac{1}{2} - 4\nu, -\frac{1}{2} - 4\nu, -\frac{1}{2} - 4\nu \end{array} \right. \right), \quad (4.52)$$

allerdings ist eine Reihenentwicklung dieser Funktion sehr kompliziert. Bedeutend einfacher lässt sich dieses Integral für den attraktiven Fall des nächsten Abschnittes 4.2.3.2 behandeln,

da hier dieser Ausdruck auf das Integral aus Gleichung (3.82) zurückgeführt werden kann. Das Ergebnis für den repulsiven Fall folgt dann mit der Transformation (3.101) direkt aus dem Attraktiven, so dass wir hier nur das Ergebnis angeben:

$$(r_{\text{eff},0}^{\text{rep}})^2 = 2 \int_0^\infty \left[ (v^{(0)}(r))^2 - (u_{\text{reg}}^{(0)}(r))^2 \right] dr = \mathbf{r}_{\text{eff},0}^2 e^{+2i\pi\nu} = \frac{[\nu^\nu \Gamma(1-2\nu)]^4}{2\Gamma(1-4\nu)} \beta_\alpha^2. \quad (4.53)$$

Numerische Werte von  $a^{\text{rep}}$  und  $(r_{\text{eff},0}^{\text{rep}})^2$  für ganzzahlige  $\alpha > 2$  sind in Tabelle 4.1 aufgeführt. Endliche Werte von  $(r_{\text{eff},0}^{\text{rep}})^2$  existieren nur für  $\alpha > 4$  (s. hierzu Abschnitt 4.2.3.3) und  $(r_{\text{eff},0}^{\text{rep}})^2$  ist für  $\alpha < 6$  negativ.

Das Schwellenverhalten der Streuphase für die Streuung an homogenen repulsiven Potentialen (4.45) ist in Abbildung 4.2 dargestellt. Das Bild oben links zeigt die numerisch berechneten Streuphasen für  $\alpha = 3$  bis  $\alpha = 7$ . Die restlichen Bilder zeigen, jedes für ein bestimmtes  $\alpha$ , die numerisch berechneten Phasenverschiebungen (durchgezogene Linien) zusammen mit dem führenden Beitrag (4.50) (gepunktete Linien). Für  $\alpha = 5$  bis  $\alpha = 7$  zeigt die gestrichelte Linie das Resultat für die effektive-range Entwicklung (4.30), während für  $\alpha = 4$  die gestrichelte Linie das Ergebnis der modifizierten effective-range Entwicklung (4.86) darstellt, die im nächsten Abschnitt 4.2.3.3 hergeleitet wird. Die vertikale, gepunktete Linie gibt die Position von  $k\beta_\alpha = x_\alpha$  an, bei der die Funktion  $L(k a^{\text{rep}})$  nach (4.51) Null ist.

Deutlich erkennbar ist, dass der führende Beitrag (4.18) den abrupten Abfall aller Streuphasen nahe der Schwelle sehr gut reproduziert. Für  $\alpha = 4$  stimmt das analytische Ergebnis unter Berücksichtigung des modifizierten Beitrags der effektiven Reichweite nach Gleichung (4.86) für einen großen Wertebereich bis etwa  $k\beta_4 \approx 0.75$  gut überein. Hingegen führt für  $\alpha = 5$  die effective-range Entwicklung (4.30) zu einem schlechteren Ergebnis für  $k\beta_5 \gtrsim 0.4$ ; in diesem Fall hat  $(r_{\text{eff},0}^{\text{rep}})^2$  einen großen negativen Wert, welcher das Verhalten der analytischen Lösung stark beeinflusst. Dass die effective-range Entwicklung (4.30) trotzdem richtig ist, überprüfen wir wieder analog zu (3.91). Abbildung 4.3 zeigt die Differenz  $\Delta_{m=0}(k\beta_5)$

$$\Delta_{m=0}(k\beta_5) = \delta_{\text{num}}(k\beta_5) - \delta_{\text{ana}}(k\beta_5) \quad (4.54)$$

geteilt durch  $(k\beta_5)^2$ , die für  $k\beta_5 \rightarrow 0$  gegen Null konvergiert, so dass alle Beiträge bis einschließlich der Ordnung  $\mathcal{O}(k^2)$  richtig sind.

Für  $\alpha = 6$  ist  $(r_{\text{eff},0}^{\text{rep}})^2 = 0$  und die effective-range Entwicklung bis einschließlich der Ordnung  $\mathcal{O}(k^2)$  liefert das gleiche Ergebnis wie der führende Beitrag (4.50). Für  $\alpha = 7$  ist dieser für  $k\beta_7 \approx 1$  bis auf  $0.016\pi$  genau. Dieser Fehler wird durch die effective-range Formel (4.30) um mehr als einen Faktor 5 reduziert. Eine vergleichbare oder bessere Genauigkeit wird für höhere  $\alpha$  erreicht.

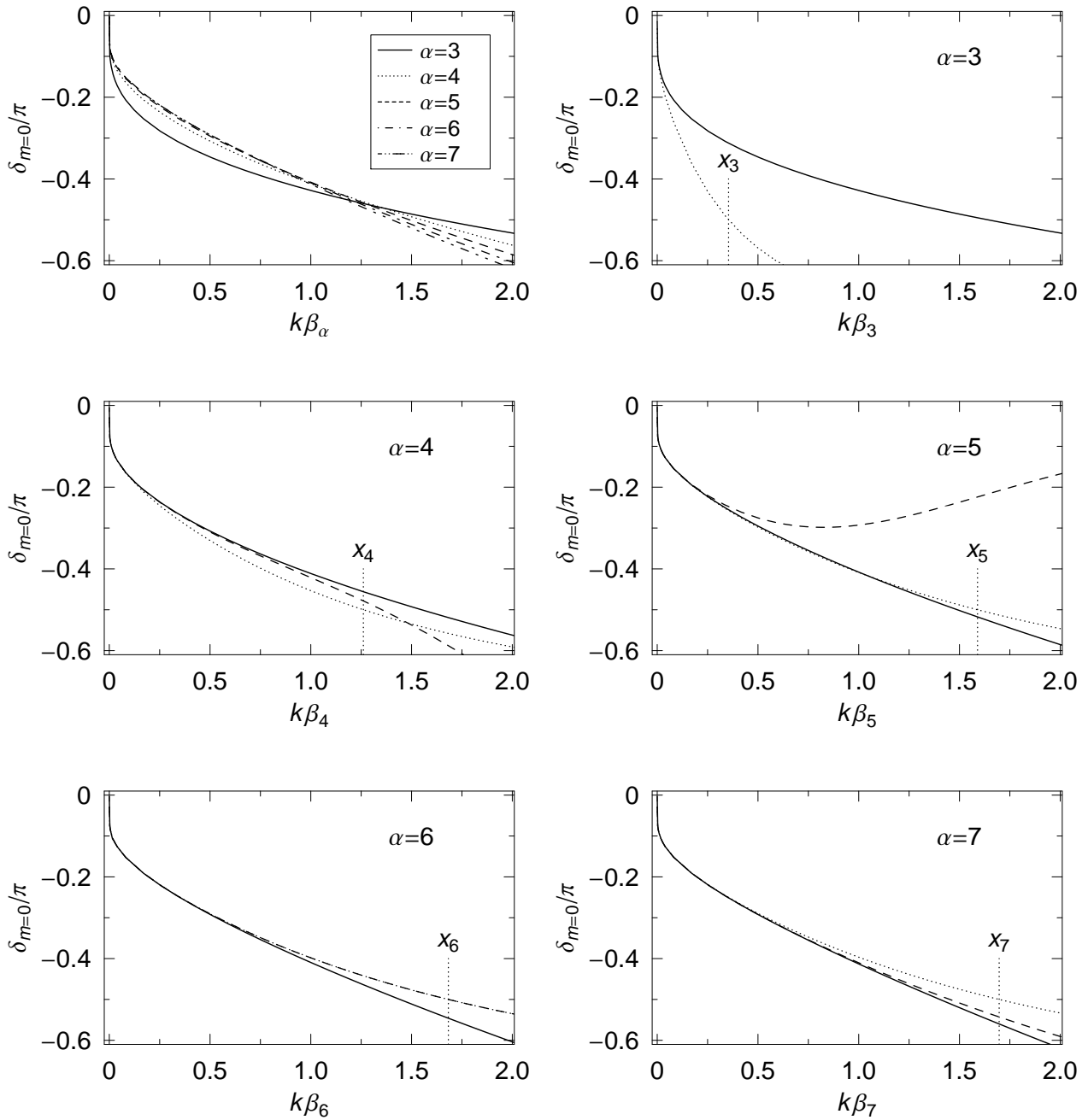
#### 4.2.3.2 Quantenreflexion an attraktiven Potentialen

Für den homogenen, attraktiven Potentialschwanz

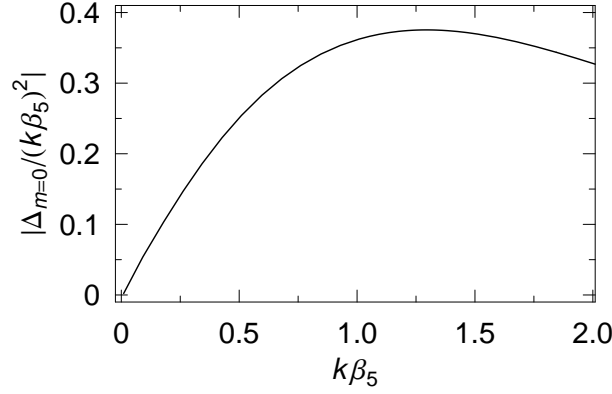
$$V_{\text{tail}}(r) = V_\alpha^{\text{att}}(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}} \frac{(\beta_\alpha)^{\alpha-2}}{r^\alpha}, \quad \alpha > 2, \quad (4.55)$$

wird die richtig normierte Lösung der Schrödinger-Gleichung bei  $E = 0$  und  $m = 0$ , welche einlaufende Randbedingungen beschreibt, durch Hankel-Funktionen der Ordnung 0 und dem Argument  $z$  aus (4.46) durch

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{(0)}(r) &= -i\pi\nu\sqrt{r}H_0^{(1)}(z) \\ &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} -i\pi\nu\sqrt{r} - \sqrt{r} \left[ \ln\left(\frac{r}{\beta_\alpha}\right) - 2\nu[\gamma_E + \ln(\nu)] \right], \end{aligned} \quad (4.56)$$



**Abbildung 4.2:** Die Streuphase  $\delta_{m=0}(k)$  für die  $s$ -Wellenstreuung am homogenen repulsiven Potential (4.45) in zwei Dimensionen. Das obere linke Bild zeigt die numerisch berechneten Streuphasen für  $\alpha = 3$  bis  $\alpha = 7$ . In den restlichen Bildern, jedes für ein anderes  $\alpha$ , werden die numerischen Ergebnisse (durchgezogene Linien) mit dem führenden Verhalten (4.50) (gepunktete Linien) verglichen, während die gestrichelte Linien die effective-range Entwicklung (4.30) für  $\alpha > 4$  bzw. die modifizierte effective-range Entwicklung (4.86) (für  $\alpha = 4$ ) zeigt. Die senkrechten, gepunkteten Linien geben die Stelle  $k\beta_\alpha = x_\alpha$  an, bei welcher der Logarithmus  $L(k a^{\text{rep}})$  nach Gleichung (4.51) Null ist.



**Abbildung 4.3:** Differenz (4.54) zwischen der numerisch berechneten Streuphase und der effective-range Entwicklung (4.30) für die Streuung an dem repulsiven Potential (4.45) mit  $\alpha = 5$ . Die Kurve zeigt den Betrag der Differenz (4.54) geteilt durch  $(k\beta_5)^2$ .

dargestellt. Vergleichen wir (4.56) mit (4.34), so können wir die komplexe Streulänge  $\mathfrak{a}$  definieren durch:

$$|\mathfrak{a}| = \nu^{2\nu} \exp(2\nu\gamma_E)\beta_\alpha, \quad \arg(\mathfrak{a}) = -\pi\nu, \quad (4.57)$$

wobei wieder ein einfacher Zusammenhang zwischen der reellen Streulänge (4.49) und  $\mathfrak{a}$  besteht. Die Transformation

$$\beta_\alpha \rightarrow \beta_\alpha e^{-i\pi\nu}, \quad (4.58)$$

liefert aus der reellen Streulänge  $a^{\text{rep}}$  die komplexe Streulänge  $\mathfrak{a}$ :

$$\mathfrak{a} = a^{\text{rep}} e^{-i\pi\nu}, \quad |\mathfrak{a}| = a^{\text{rep}}. \quad (4.59)$$

Es fehlt lediglich die Bestimmung des Integrals aus (4.36). Hierfür folgen wir dem Verfahren aus Abschnitt 3.3 und lösen zunächst das unbestimmte Integral für den Beitrag der Lösung  $\mathbf{v}^{(0)}(r)$  aus (4.34):

$$\int (\mathbf{v}^{(0)}(r'))^2 dr' = \frac{r^2}{4} - \frac{1}{2}r^2 \ln\left(\frac{r}{\mathfrak{a}}\right) + \frac{1}{2}r^2 \ln^2\left(\frac{r}{\mathfrak{a}}\right). \quad (4.60)$$

Für  $r \rightarrow \infty$  divergiert dieses Integral, aber da die Funktionen  $\mathbf{v}^{(0)}(r)$  und  $\mathbf{u}^{(0)}(r)$  asymptotisch gleich sind, heben sich die jeweiligen Divergenzen auf. Der Grenzwert  $r \rightarrow 0$  von (4.60) existiert und ist Null, sodass aus diesem Integral kein Beitrag zu  $\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2$  übrig bleibt. Der einzige Beitrag zur effektiven Reichweite stammt aus dem Integral  $\int (\mathbf{u}^{(0)}(r))^2 dr$  im Grenzwert  $r \rightarrow 0$ . Aber anstatt direkt mit  $\mathbf{u}^{(0)}(r)$  zu rechnen, definieren wir zunächst die Funktion

$$\tilde{\mathbf{u}}^{(0)}(r) = -i\pi\nu\sqrt{r}H_\mu^{(1)}(z) = -i\pi\nu\sqrt{r}(J_\mu(z) + iY_\mu(z)), \quad (4.61)$$

die im Limes  $\mu \rightarrow 0$  mit  $\mathbf{u}^{(0)}(r)$  übereinstimmt. Das auszuwertende Integral lautet nun:

$$\int (\tilde{\mathbf{u}}^{(0)}(r))^2 dr = (\pi\nu)^2 \int z^{-4\nu-1} (-J_\mu^2(z) - 2iJ_\mu(z)Y_\mu(z) + Y_\mu^2(z)) dz. \quad (4.62)$$

Jedes dieser Integrale kann analytisch gelöst werden und wir erhalten z.B. für den ersten Term mit Gleichung (3.82) im Grenzwert Limes  $z \rightarrow \infty$  (d.h.  $r \rightarrow 0$ ) und  $\mu \rightarrow 0$ :

$$\lim_{\mu \rightarrow 0} \lim_{z \rightarrow \infty} -(\pi\nu)^2 \int z^{-4\nu-1} J_\mu^2(z) dz = -(\pi\nu)^2 \frac{\Gamma(-2\nu)\Gamma(\frac{1}{2} + 2\nu)}{2\sqrt{\pi}\Gamma^2(1 + 2\nu)}. \quad (4.63)$$

Analog lassen sich die restlichen Terme in (4.62) berechnen und insgesamt folgt für  $\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2$  (und somit auch für  $(r_{\text{eff},0}^{\text{rep}})^2$  aus (4.53)):<sup>3</sup>

$$\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2 = 2 \int_0^\infty \left[ (\mathbf{v}^{(0)}(r))^2 - (\mathbf{u}^{(0)}(r))^2 \right] dr = \frac{[\nu^\nu \Gamma(1-2\nu)]^4}{2 \Gamma(1-4\nu)} \beta_\alpha^2 e^{-2i\pi\nu} = (r_{\text{eff},0}^{\text{rep}})^2 e^{-2i\pi\nu} . \quad (4.64)$$

Numerische Werte für der Realteil  $\Re[\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2]$  und den Imaginärteil  $\Im[\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2]$  von  $\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2$  sind in Tabelle 4.1 aufgeführt.

Für die homogenen Potentialschwänze erhalten wir für den Realteil des Logarithmus (4.21)

$$L(k|\mathbf{a}|) = \ln\left(\frac{k\beta_\alpha}{2}\right) + \gamma_E + 2\nu [\ln(\nu) + \gamma_E] , \quad (4.65)$$

und Formel (4.44) wird zu

$$R_{m=0}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -i \left[ 1 + \frac{i\pi}{L(k|\mathbf{a}|) + \frac{1}{2}k^2\Re[\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2] - i\left([\nu + \frac{1}{2}]\pi - \frac{1}{2}k^2\Im[\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2]\right)} \right] . \quad (4.66)$$

Berücksichtigen wir nur Terme der Ordnung  $k^0$  in der Entwicklung (4.35) für  $\cot \delta_{m=0}(k)$ , setzen wir also in (4.66)  $\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2 = 0$ , gilt für den führenden Term von  $|R_{m=0}(k)|^2$  analog zu (3.28),

$$|R_{m=0}(k)|^2 \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} 1 - \frac{2\pi^2\nu}{L(k|\mathbf{a}|)^2 + \left(\nu + \frac{1}{2}\right)^2 \pi^2} \quad (4.67)$$

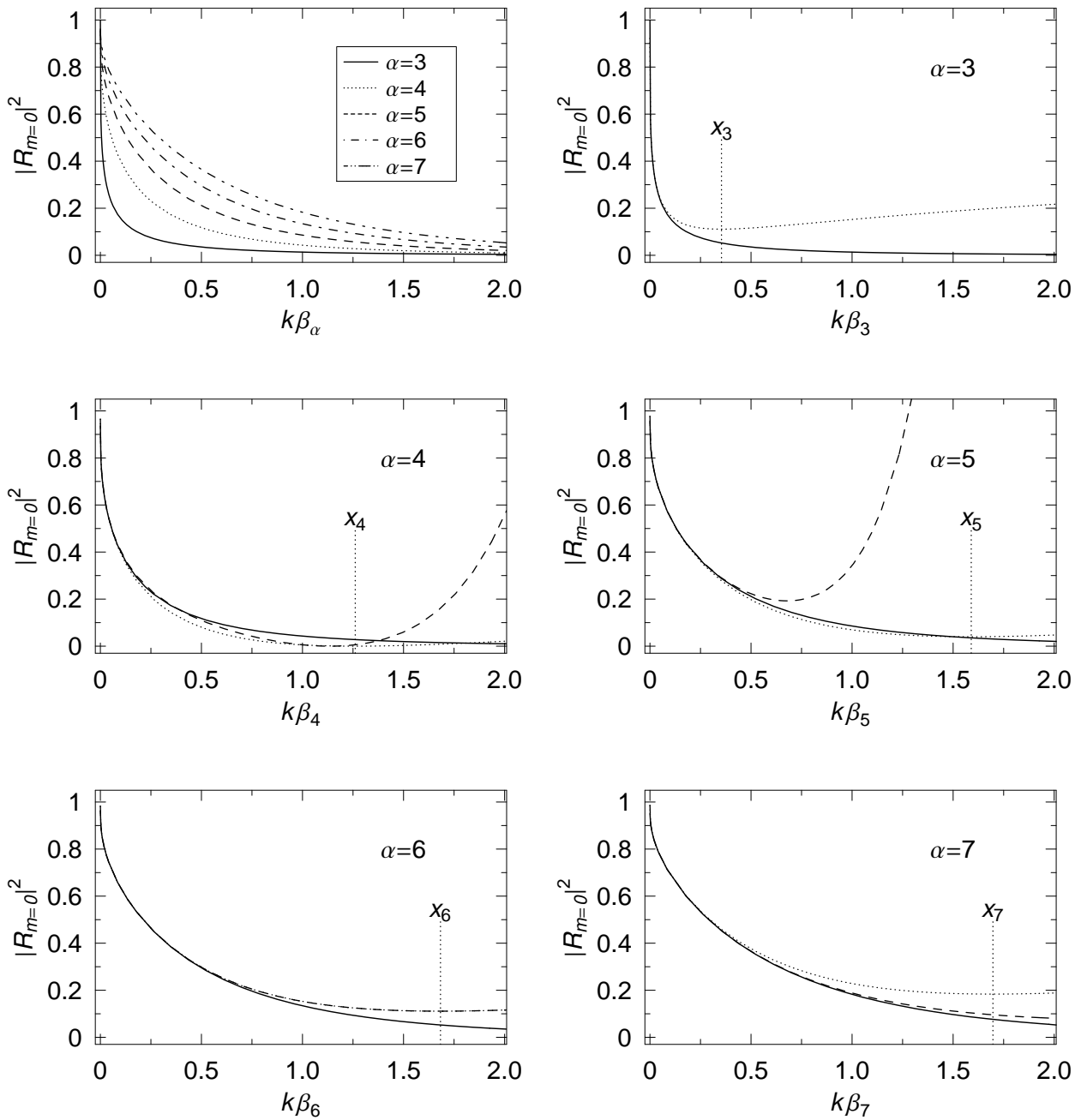
und die Phase von  $R_{m=0}(k)$  (vgl. (3.30)):

$$\arg R_{m=0}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -\frac{\pi}{2} + \frac{\pi L(k|\mathbf{a}|)}{L(k|\mathbf{a}|)^2 + \arctan\left([\nu^2 - \frac{1}{4}]\pi^2\right)} . \quad (4.68)$$

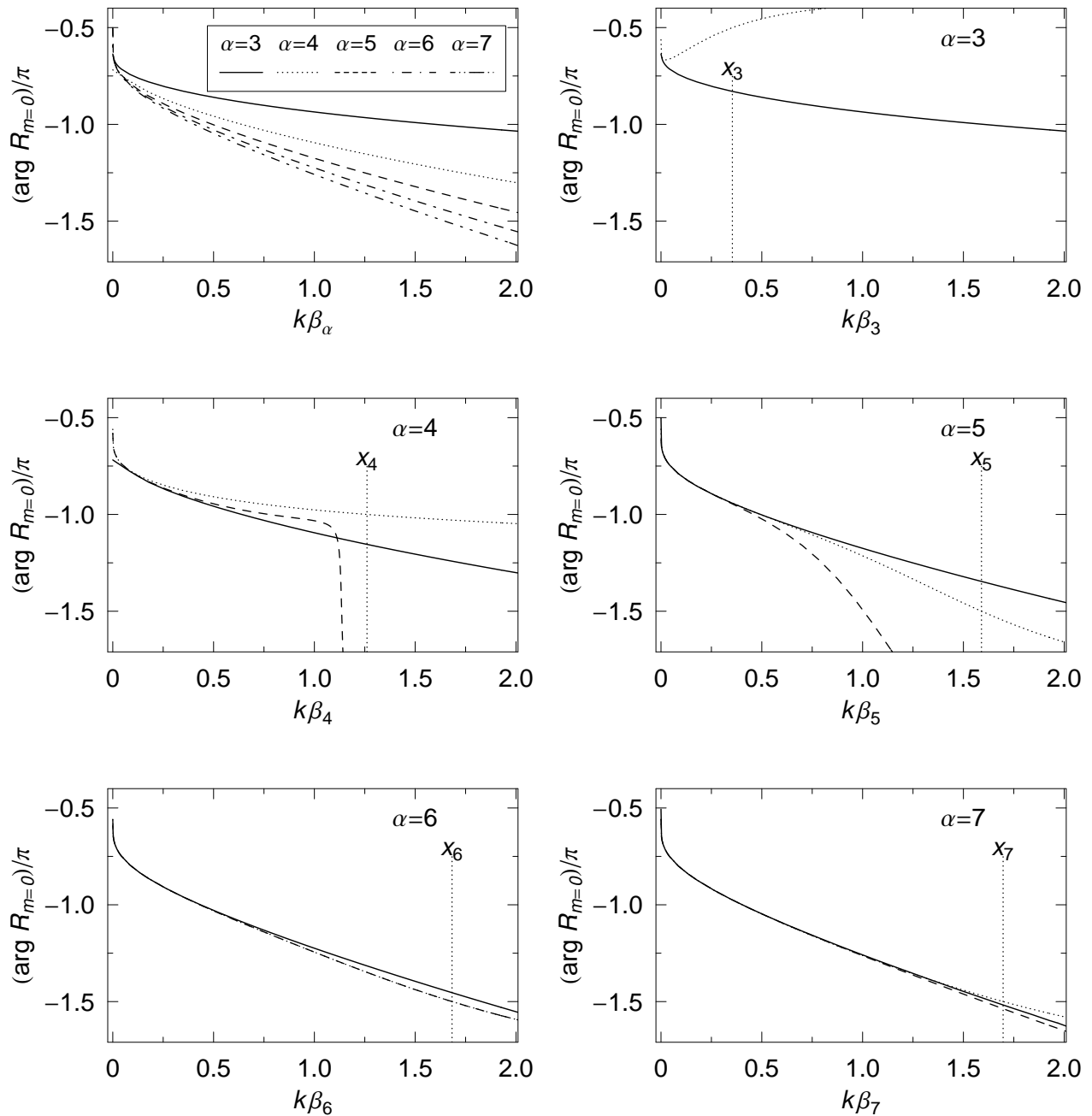
Abbildung 4.4 zeigt die Wahrscheinlichkeit für die Quantenreflexion,  $|R_{m=0}(k)|^2$ , für verschiedene Potenzen von  $\alpha$ . Im oberen linken Bild zeigen die Kurven die numerisch berechneten Werte von  $|R_{m=0}(k)|^2$  für  $\alpha = 3$  bis  $\alpha = 7$ . In den restlichen Bildern vergleichen wir wieder die numerischen Ergebnisse von  $|R_{m=0}(k)|^2$  (durchgezogene Linien) mit dem führenden Beitrag (4.67) (gepunktete Linien) und der effective-range Entwicklung (4.66) für  $\alpha > 4$  und der modifizierten effective-range Entwicklung (4.81) für  $\alpha = 4$  (gestrichelte Linien), vgl. Abschnitt 4.2.3.3. Im Limes  $k \rightarrow 0$  strebt die Wahrscheinlichkeit für Quantenreflexion wie im drei-dimensionalen Fall gegen 1, sie fällt jedoch sehr viel schneller auf Grund des Logarithmus im Nenner von (4.67) ab. Für ein gegebenes  $k\beta_\alpha$  nimmt die Reflexionswahrscheinlichkeit für höhere  $\alpha$  zu, wie bei der  $s$ -Wellenstreuung in drei Dimensionen (vgl. Abbildung 3.7).

Das Argument  $\arg R_{m=0}(k)$  der Quantenreflexionsamplitude für die homogenen Potentialschwänze (4.55) zeigt Abbildung 4.5. In dem oberen linken Bild sind die numerisch berechneten Werte von  $\arg R_{m=0}(k)$  als Funktion von  $k\beta_\alpha$  für  $\alpha = 3$  bis  $\alpha = 7$  aufgetragen. Analog zum vorherigen Bild zeigen die restlichen Abbildungen den Vergleich der numerisch berechneten Werte von  $\arg R_{m=0}(k)$  (durchgezogene Linien) mit den Ergebnissen des führenden Beitrags (4.68) (gepunktete Linien) bzw. für die effective-range Entwicklung (4.66) für  $\alpha > 4$  und für  $\alpha = 4$  (gestrichelte Linien) die modifizierte effective-range Entwicklung (4.81). Wie für die Reflexionswahrscheinlichkeiten reproduziert die effective-range Entwicklung (4.66) die numerischen Ergebnisse mit Ausnahme von  $\alpha = 5$  gut. Für  $\alpha = 4$  ist

<sup>3</sup>Mit dieser Definition ist  $\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2$  ein Quadrat einer Länge.



**Abbildung 4.4:** Wahrscheinlichkeit  $|R_{m=0}(k)|^2$  für die  $s$ -Wellenquantenreflexion am homogenen Potential (4.55) in zwei Dimensionen. Die Ergebnisse für  $\alpha = 3$  bis  $\alpha = 7$  sind im oberen linken Bild dargestellt. In den restlichen Bildern zeigen die durchgezogenen Linien die numerischen Ergebnisse, die gepunkteten Linien den führenden Beitrag (4.67) und die gestrichelten Linien die effective-range Entwicklung (4.66) für  $\alpha > 4$  bzw. die modifizierte effective-range Entwicklung (4.81) für  $\alpha = 4$ . Die senkrechten, gepunkteten Linien geben den Wert  $k\beta_\alpha = x_\alpha$  an, an welchem der Logarithmus  $L(k|\alpha)$  nach Gleichung (4.51) Null ist.



**Abbildung 4.5:** Argument  $\arg R_{m=0}(k)$  für die  $s$ -Wellenquantenreflexion am homogenen attraktiven Potential (4.55) in zwei Dimensionen. Die Ergebnisse für  $\alpha = 3$  bis  $\alpha = 7$  sind im oberen linken Bild dargestellt. In den restlichen Bildern zeigen die durchgezogenen Linien die numerischen Ergebnisse, die gepunkteten Linien den führenden Beitrag (4.68) und die gestrichelten Linien die effective-range Entwicklung (4.66) für  $\alpha > 4$  bzw. die modifizierte effective-range Entwicklung (4.81) für  $\alpha = 4$ . Die senkrechten, gepunkteten Linien geben den Wert  $k\beta_\alpha = x_\alpha$  an, an welchem der Logarithmus  $L(k|a)$  nach Gleichung (4.51) Null ist.

$\alpha$	3	4	5	6	7	$\alpha \rightarrow \infty$
$a^{\text{rep}}/\beta_\alpha$	3.1722190	0.8905362	0.7063830	0.6672841	0.6617358	1
$(\arg \mathbf{a})/\pi$	-1	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{5}$	$-\frac{1}{\alpha-2}$
$x_\alpha$	0.3539853	1.2609470	1.5896745	1.6828198	1.6969295	1.1229190
$(r_{\text{eff},0}^{\text{rep}})^2/\beta_\alpha^2$	—	vgl. (4.86)	-1.4651483	0	0.1478103	$\frac{1}{2}$
$\Re [\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2]/\beta_\alpha^2$	—	vgl. (4.81)	0.7325741	0	0.0456759	$\frac{1}{2}$
$\Im [\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2]/\beta_\alpha^2$	—	vgl. (4.81)	1.2688556	0	-0.1405759	$-\frac{\pi}{\alpha-2}$

**Tabelle 4.1:** Die charakteristischen Parameter für homogene Potentiale in zwei Dimensionen. Die erste Reihe zeigt die (reelle) Streulänge  $a^{\text{rep}}$  (4.49) für das repulsive Potential (4.45) und die zweite Reihe das Argument  $\arg \mathbf{a}$  (4.57) für die komplexe Streulänge  $\mathbf{a}$  für den attraktiven Potentialschwanz (4.55). Beachte, dass nach Gleichung (4.59)  $|\mathbf{a}| = a^{\text{rep}}$  gilt. Die dritte Reihe zeigt die dimensionslose Zahl  $x_\alpha$ , welche den Wert von  $k\beta_\alpha$  angibt, bei dem der Logarithmus  $L(k|\mathbf{a}|)$  verschwindet, s. (4.51). Die nächsten drei Reihen zeigen  $(r_{\text{eff},0}^{\text{rep}})^2$  (4.53) für repulsive Potentiale (4.45), sowie den Real- als auch den Imaginärteil von  $\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2$  (4.64) für attraktive Potentiale (4.55).

die modifizierte effective-range Entwicklung (4.86) eine Verbesserung; der Abfall durch  $\pi$  bei etwa  $k\beta_4 \approx 1.1$  wird in Abschnitt 4.2.3.3 besprochen.

Ebenso wie im drei-dimensionalen Fall können wir die Ableitung von  $\arg R_{m=0}(k)$  nach der Energie bzw. der Wellenzahl mit einer Ortsverschiebung  $\Delta r$  in Verbindung bringen:

$$\Delta r = -\frac{1}{2} \frac{d}{dk} (\arg R_{m=0}(k)) . \quad (4.69)$$

Die Ableitungen von  $\arg R_{m=0}(k)$  nach der Wellenzahl  $k$  sind immer negativ (vgl. Abbildung 4.5), so dass  $\Delta r > 0$  ist; der “virtuelle” Umkehrpunkt liegt vor dem Ursprung. Dies bringt einen Zeitgewinn gegenüber dem freien Teilchen (also auch ohne dem Zentrifugalterm) mit sich, das bei  $r = 0$  reflektiert wird.

#### 4.2.3.3 Der Sonderfall: $\alpha = 4$

Für die  $s$ -Wellenstreuung im drei-dimensionalen Fall modifizierten O’Malley *et al.* [82] die effective-range Theorie für den Sonderfall  $\alpha = 4$  mit Hilfe der Mathieu-Funktionen. In diesem Abschnitt übertragen wir diese Theorie auf den zwei-dimensionalen Fall und bestimmen eine modifizierte effective-range Entwicklung für die  $s$ -Wellenstreuung und Quantenreflexion an einem homogenen Potential  $\pm 1/r^4$  in zwei Dimensionen.

Die Schrödinger-Gleichung (4.4) für  $m = 0$  mit dem repulsiven Potential

$$V^{\text{rep}}(r) = \frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}} \frac{\beta_4^2}{r^4} \quad (4.70)$$

kann mit Hilfe der Variablen

$$\phi = \frac{u_0}{\sqrt{r}}, \quad y = \ln\left(\frac{r}{\beta_4}\right), \quad y_0 = \ln\left(\frac{1}{\sqrt{k\beta_4}}\right), \quad \xi = y - y_0 = \ln\left(\frac{kr}{\sqrt{k\beta_4}}\right) \quad (4.71)$$

auf folgende Form transformiert werden:

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} + 2k\beta_4 \sinh(2\xi)\phi(\xi) = 0 . \quad (4.72)$$

Für den attraktiven Potentialschwanz

$$V_{\text{tail}}(r) = V^{\text{att}}(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}} \frac{\beta_4^2}{r^4}, \quad (4.73)$$



führen die gleichen Transformationen (4.71) zu

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} + 2k\beta_4 \cosh(2\xi)\phi(\xi) = 0. \quad (4.74)$$

Dies ist im Wesentlichen Gleichung (3.4) aus [82], mit der Ausnahme, dass der Zentrifugalterm  $-(l + \frac{1}{2})^2$  in Gleichung (4.74) fehlt, da die  $s$ -Wellen in zwei Dimensionen ( $m = 0$ ) einer Drehimpulsquantenzahl  $l = -\frac{1}{2}$  entsprechen.

In Gleichung (4.74) ist der Potentialterm symmetrisch und die Lösungen sind einfacher als diejenigen von (4.72) zu bestimmen. Ein Satz von Lösungen besteht aus den Mathieu-Funktionen  $M_{\nu_M}^{(j)}(\xi)$  [107], die durch einen charakteristischen Parameter  $\nu_M$  gekennzeichnet sind und sich für große positive Argumente wie

$$M_{\nu_M}^{(j)}(\xi) \stackrel{\xi \rightarrow \infty}{\sim} \mathcal{C}_{\nu_M}^{(j)} \left( 2\sqrt{k\beta_4} \cosh \xi \right) \quad (4.75)$$

verhalten. Hier stehen die  $\mathcal{C}_{\nu_M}^{(j)}$  für die Bessel-Funktionen und konventionsgemäß die Indizes  $j = 1, 2, 3, 4$  für die Fälle  $J_{\nu_M}, Y_{\nu_M}, H_{\nu_M}^{(1)}, H_{\nu_M}^{(2)}$ . Der charakteristische Parameter ist abhängig von dem Faktor  $2k\beta_4$  in dem  $\cosh$ -Term in (4.74) und kann für kleine Werte entwickelt werden:

$$\nu_M \stackrel{k\beta_4 \rightarrow 0}{\sim} \frac{k\beta_4}{\sqrt{2}} + \mathcal{O}((k\beta_4)^3). \quad (4.76)$$

Aus Gleichung (4.71) folgt, dass  $\xi \rightarrow -\infty$  dem Grenzwert  $r \rightarrow 0$  entspricht und  $\xi \rightarrow +\infty$  dem Grenzwert  $r \rightarrow \infty$ . Das Argument der Bessel-Funktionen in (4.75) lautet:

$$2\sqrt{k\beta_4} \cosh \xi = kr + \frac{\beta_4}{r}. \quad (4.77)$$

Eine Lösung von (4.74), die einlaufende Randbedingungen für  $r \rightarrow 0$  beschreibt, ist eine Hankel-Funktion der Ordnung  $\nu_M$  und dem Argument  $\beta_4/r$ :

$$\phi(r) = \sqrt{r} M_{\nu_M}^{(3)}(-\xi) \stackrel{r \rightarrow 0}{\sim} \sqrt{r} H_{\nu_M}^{(1)}\left(\frac{\beta_4}{r}\right). \quad (4.78)$$

Für große Abstände  $r$  kann die Wellenfunktion (4.78)

$$\begin{aligned} M_{\nu_M}^{(3)}(-\xi) &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} M_{\nu_M}^{(4)}(\xi) + R_{\nu_M} M_{\nu_M}^{(3)}(\xi) \\ &\equiv H_{\nu_M}^{(2)}(kr) + R_{\nu_M} H_{\nu_M}^{(1)}(kr) \end{aligned} \quad (4.79)$$

an eine Überlagerung von einlaufenden und reflektierten Wellen angepasst werden. Nach [107] gilt:

$$R_{\nu_M} = -\frac{1}{2} \left[ \frac{M_{\nu_M}^{(4)}(0)}{M_{\nu_M}^{(3)}(0)} + \frac{M_{\nu_M}^{(4)'}(0)}{M_{\nu_M}^{(3)'}(0)} \right]. \quad (4.80)$$

Auf Grund der zusätzlichen Phase  $\pm(\frac{1}{2}\nu_M + \frac{1}{4})\pi$  in der Asymptotik der Hankel-Funktionen (für große  $kr$ ), wird die Reflexionsamplitude nach (4.32) durch  $R_{m=0}(k) = -i R_{\nu_M} e^{-i\pi\nu_M}$  definiert. Das führende Verhalten der Reflexion folgt aus [107] und wir erhalten:

$$R_{m=0}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -i \frac{L(k|\mathbf{a}|)}{L(k|\mathbf{a}|) - i\pi} + \pi(k\beta_4)^2 \frac{3 - 4\zeta(3) - \pi^2 L(k|\mathbf{a}|) - 3i\pi L(k|\mathbf{a}|)^2 + 2L(k|\mathbf{a}|)^3}{12[L(k|\mathbf{a}|) - i\pi]^2}, \quad (4.81)$$

wobei  $\zeta$  die Riemannsche Zeta-Funktion ist. Der Logarithmus  $L(x)$  für  $\alpha = 4$ ,  $\nu = \frac{1}{2}$  nach (4.65) lautet:

$$L(k|\mathfrak{a}|) = 2\gamma_E + \ln(k\beta_4/4) = \ln(k\beta_4) + 2(\gamma_E - \ln 2). \quad (4.82)$$

Der Beitrag des ersten Terms auf der rechten Seite von (4.81) beschreibt in Übereinstimmung mit (4.67) und (4.68) den führenden Beitrag zu  $|R_{m=0}(k)|^2$  und  $\arg R_{m=0}(k)$ . Der zweite Ausdruck in (4.81) modifiziert den Term zweiter Ordnung in der effective-range Entwicklung für  $\alpha = 4$ . Wie in den Abbildungen 4.4 und 4.5 in Abschnitt 4.2.3.2 gezeigt, gibt Gleichung (4.81) relativ gut das Verhalten von  $|R_{m=0}(k)|^2$  und  $\arg R_{m=0}(k)$  über einen großen Wertebereich von  $k\beta_4$  wieder und ist eine deutliche Verbesserung gegenüber den führenden Termen (4.67), (4.68). Bei  $k\beta_4 \approx 1.1$  tritt ein sanfter, aber relativ tiefer Abfall durch  $\pi$  in der Gleichung (4.81) für  $\arg R_{m=0}(k)$  auf. Für größere Werte von  $k\beta_4$  folgt aus Gleichung (4.81) ein Wert von  $\arg R_{m=0}(k)$ , der nahe der Null (modulo  $2\pi$ ) ist, wohingegen der exakte numerische Wert nahe bei  $-\pi$  liegt.

Obige Ergebnisse für Quantenreflexion an attraktiven Potentialschwänzen können auch auf den Fall der Streuung an repulsiven Potentialen übertragen werden. Die Transformation, die das attraktive Potential (4.73) in das repulsive Potential (4.70) und die einlaufenden Randbedingungen in eine reguläre Wellenfunktion in der Nähe des Ursprungs überführt, lautet (vgl. (4.58)):

$$\beta_4 \longrightarrow \beta_4 e^{+i\pi\nu} = i\beta_4. \quad (4.83)$$

Der Logarithmus  $L(k|\mathfrak{a}|) = L(k a^{\text{rep}}) = \ln\left(\frac{1}{2}k a^{\text{rep}}\right) + \gamma_E$ , der in den Formeln für die Streuung am repulsiven Potential (4.70) auftritt, muss durch  $\ln\left(\frac{1}{2}k a^{\text{rep}}\right) - i\frac{\pi}{2} + \gamma_E$  für die entsprechende Gleichung der Quantenreflexion am attraktiven Potential (4.73) ersetzt werden. Für die umgekehrte Transformation wird  $\ln\left(\frac{1}{2}k a^{\text{rep}}\right) + \gamma_E$  durch  $\ln\left(\frac{1}{2}k a^{\text{rep}}\right) + i\frac{\pi}{2} + \gamma_E$  ersetzt. Um den Ausdruck (4.81) für Quantenreflexion am attraktiven Potentialschwanz (4.73) auf die Streuung am repulsiven Potential (4.70) zu übertragen, muss noch zusätzlich zu (4.83) die Transformation

$$L(k|\mathfrak{a}|) \longrightarrow L(k|\mathfrak{a}|) + i\frac{\pi}{2} \quad (4.84)$$

ausgeführt werden. Die Gleichungen (4.83) und (4.84) eingesetzt in (4.81) ergeben folgenden Ausdruck für die  $S$ -Matrix,  $S_{m=0}(k) = iR_{m=0}(k)$  (vgl. (4.32), (4.33)) für die Streuung an dem repulsiven Potential (4.70):

$$S_{m=0}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{L(k|\mathfrak{a}|) + i\frac{\pi}{2}}{L(k|\mathfrak{a}|) - i\frac{\pi}{2}} - i\pi(k\beta_4)^2 \frac{3 - 4\zeta(3) + \frac{\pi^2}{2}L(k|\mathfrak{a}|) + 2L(k|\mathfrak{a}|)^3}{12 [L(k|\mathfrak{a}|) - i\frac{\pi}{2}]^2}, \quad (4.85)$$

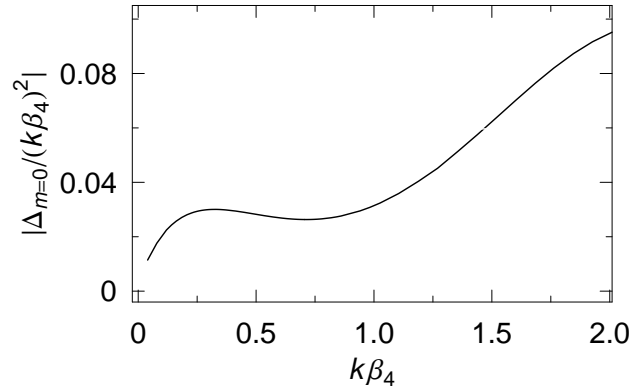
und wir erhalten den Kotangens der reellen Streuphase  $\delta_{m=0}(k)$ :

$$\cot \delta_{m=0}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{2}{\pi} \left[ L(k|\mathfrak{a}|) + \frac{(k\beta_4)^2}{2} \left( \frac{1}{2} - \frac{2}{3}\zeta(3) + \frac{\pi^2}{12}L(k|\mathfrak{a}|) + \frac{1}{3}L(k|\mathfrak{a}|)^3 \right) \right]. \quad (4.86)$$

Um zu zeigen, dass (4.86) die richtige Entwicklung bis einschließlich der Ordnung  $\mathcal{O}(k^2)$  ist, zeigt Abbildung 4.6 den Betrag der Differenz

$$\Delta_{m=0}(k\beta_4) = \delta_{\text{num}}(k\beta_4) - \delta_{\text{ana}}(k\beta_4) \quad (4.87)$$

zwischen dem Ergebnis der numerisch berechneten Streuphase und der Entwicklung aus (4.86) geteilt durch  $(k\beta_4)^2$ . Die Kurve in Abbildung 4.6 konvergiert für  $k\beta_4 \rightarrow 0$  gegen Null; die Differenz (4.87) hat eine höhere Ordnung als  $(k\beta_4)^2$ . Wie bereits in Abbildung 4.2 in Abschnitt 4.2.3.2 gezeigt, reproduziert Gleichung (4.86) das Verhalten der  $s$ -Wellenstreuphase gut über einen großen Wertebereich von  $k\beta_4$  und ist eine Verbesserung gegenüber dem führenden Term (4.50).



**Abbildung 4.6:** Differenz (4.87) zwischen der numerisch berechneten Streuphase und dem Ergebnis aus der effective-range Entwicklung (4.86) für die Streuung an dem repulsiven Potential (4.70). Die Kurve zeigt den Betrag der Differenz (4.87) geteilt durch  $(k\beta_4)^2$ .

### 4.3 Höhere Drehimpulsquantenzahlen $m$

Die zwei linear unabhängigen Schwellenlösungen der radialen Schrödinger-Gleichung (4.4) für  $m \neq 0$  sind proportional zu  $r^{\frac{1}{2} \pm |m|}$ . Viele Ergebnisse des drei-dimensionalen Falls können auf den zwei-dimensionalen Fall übertragen werden, wenn wir  $|m| - \frac{1}{2}$  für  $l$  schreiben. Zur Bestimmung der Streuphasen für  $m > 0$  verwenden wir die Theorie der Jost-Funktionen aus Abschnitt 3.4, deren bisherige Ergebnisse auf ganzzahlige  $l$  beschränkt sind. Diese Einschränkung ist nicht nötig und wir können die Streuphasen für beliebige  $m \neq 0$  berechnen. Nicht ganzzahlige “Drehimpuls”-Quantenzahlen spielen immer dann eine Rolle, wenn die potentielle Energie einen Beitrag proportional zu  $1/r^2$  hat und dessen Ursprung *nicht* mit dem Drehimpuls zusammen hängt. Ein Beispiel hierfür ist die Wechselwirkung einer Punktladung mit einem Dipol.

In diesem Abschnitt bestimmen wir Streuphasen für die Schrödinger-Gleichung (4.4) mit beliebigen (nicht notwendigerweise) ganzzahligen  $m \neq 0$ , d.h. das “Zentrifugal”-Potential kann repulsiv oder attraktiv sein, ist aber weniger attraktiv als der Zentrifugalterm der  $s$ -Welle in zwei Dimensionen. Da die radiale Schrödinger-Gleichung (4.4) nicht vom Vorzeichen von  $m$  abhängt, nehmen wir  $m > 0$  an, d.h.  $l = m - \frac{1}{2} > -\frac{1}{2}$ .

Um die Streuphasen  $\delta_m(k)$  für  $m > 0$  für das repulsive Potential (3.94) zu bestimmen, gehen wir wie in [27] bzw. Abschnitt 3.4 vor und drücken die Lösungen  $u_m(r)$  von (4.4) durch die  $S$ -Matrix  $S_m(k) = e^{2i\delta_m(k)}$  (vgl. (4.10)) und die Jost-Lösungen  $f_{\pm}(k, r)$  (vgl. (3.107)) aus:

$$u_m(r) = A [f_-(k, r) - i e^{-i\pi m} S_m(k) f_+(k, r)] . \quad (4.88)$$

Aus der Matchingbedingung (3.112), übertragen auf den zwei-dimensionalen Fall, folgt für die logarithmische Ableitung:

$$\left. \frac{u'_{\text{reg},m}}{u_{\text{reg},m}} \right|_{r=r_0} = \frac{f'_-(k, r) - i e^{-i\pi m} S_m(k) f'_+(k, r)}{f_-(k, r) - i e^{-i\pi m} S_m(k) f_+(k, r)} \Big|_{r=r_0} . \quad (4.89)$$

Die  $S$ -Matrix  $S_m(k)$  ausgedrückt durch die Jost-Funktionen  $\mathcal{F}_{\pm}(k)$  (3.114) nimmt im zwei-dimensionalen Fall die Form

$$S_m(k) = e^{2i\delta_m(k)} = i e^{-i\pi m} \frac{\mathcal{F}_-(k)}{\mathcal{F}_+(k)} \quad (4.90)$$

an, so dass sich die Streuphase aus

$$\tan \delta_m(k) = \frac{\Im \left\{ \mathcal{F}_-(k) \exp \left[ i\pi \left( \frac{m}{2} - \frac{1}{4} \right) \right] \right\}}{\Re \left\{ \mathcal{F}_-(k) \exp \left[ i\pi \left( \frac{m}{2} - \frac{1}{4} \right) \right] \right\}} \quad (4.91)$$

berechnen lässt. Mit den Substitutionen  $z = k^{2/\alpha} \beta_\alpha^{-(\alpha-2)/\alpha} r$ ,  $q = (k\beta_\alpha)^{(\alpha-2)/\alpha}$  und  $\eta = 2\nu$  erhalten wir die Entwicklung (3.165) für die Jost-Lösung  $f_-(q, z)$ :

$$\begin{aligned} f_-(q, z) &= -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{3}{4}\pi i\right) q^{1/2} \left\{ \exp\left(-\frac{1}{2}m\pi i\right) \Gamma(m) 2^m z^{-m+1/2} \times \right. \\ &\times \left[ q^{-m} + \frac{1}{4} \left( \frac{\eta^2}{1+\eta m} z^{-2/\eta} - \frac{1}{1-m} z^2 \right) q^{-m+2} + \right. \\ &+ \left. \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(-1/\eta)\Gamma(m-1/\eta)\Gamma(1/\eta+1/2)}{\Gamma(1/\eta+m+1)} \exp\left(\frac{i\pi}{\eta}\right) q^{-m+2/\eta+2} + \dots \right] + \\ &+ \exp\left(\frac{1}{2}m\pi i\right) \Gamma(-m) 2^{-m} z^{m+1/2} \left[ q^m + \frac{1}{4} \left( \frac{\eta^2}{1-\eta m} z^{-2/\eta} - \frac{1}{1+m} z^2 \right) q^{m+2} + \right. \\ &+ \left. \left. \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(-1/\eta)\Gamma(-m-1/\eta)\Gamma(1/\eta+1/2)}{\Gamma(1/\eta-m+1)} \exp\left(\frac{i\pi}{\eta}\right) q^{m+2/\eta+2} + \dots \right] \right\}. \quad (4.92) \end{aligned}$$

Nahe des Ursprung kann die reguläre Lösung mit obigen Substitutionen als

$$u_m^{\text{reg}}(q, z) \stackrel{qz \rightarrow 0}{\sim} z^{1/2} z^{1/(2\eta)} \exp(-\eta q z^{-1/\eta}) \quad (4.93)$$

geschrieben werden. Die Entwicklung von  $u_m^{\text{reg}}(q, z)$  folgt aus dem entsprechenden Ausdruck von  $f_-(q, z)$ :

$$\begin{aligned} u_m^{\text{reg}}(q, z) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (\eta q)^{1/2} \left\{ \Gamma(\eta m) 2^{\eta m} z^{m+1/2} \times \right. \\ &\times \left[ (\eta q)^{-\eta m} - \frac{1}{4} \left( \frac{1}{\eta^2(m+1)} z^2 - \frac{1}{1-\eta m} z^{-2/\eta} \right) (\eta q)^{-\eta m+2} \right. \\ &- \left. \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(-\eta)\Gamma(\eta m-\eta)\Gamma(\eta+1/2)}{\Gamma(\eta+\eta m+1)} (\eta q)^{-\eta m+2\eta+2} + \dots \right] + \\ &+ \Gamma(-\eta m) 2^{-\eta m} z^{-m+1/2} \left[ (\eta q)^{\eta m} - \frac{1}{4} \left( \frac{1}{\eta^2(1-m)} z^2 - \frac{1}{\eta m+1} z^{-2/\eta} \right) (\eta q)^{\eta m+2} \right. \\ &- \left. \left. \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(-\eta)\Gamma(-\eta m-\eta)\Gamma(\eta+1/2)}{\Gamma(\eta-\eta m+1)} (\eta q)^{\eta m+2+2\eta} + \dots \right] \right\}. \quad (4.94) \end{aligned}$$

Mit Gleichung (4.91) kann die führende  $k$ -Abhängigkeit von  $\tan \delta_m(k)$  der reellen Streuphase bestimmt werden, wenn wir uns daran erinnern, dass in (4.92) und (4.94) nur Terme proportional zu  $z^{m-1/2}$  und  $z^{-m-1/2}$  zur Entwicklung beitragen. Wie im Fall für ganzzahlige  $l$ , müssen wir zwischen nichtkritischen Potenzen und kritischen Potenzen von  $\alpha$  unterscheiden. Für die nichtkritischen Fälle erhalten wir:

$$\begin{aligned} \tan \delta_m(k) &\stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(m-1/(2\nu)) \Gamma(1/2+1/(2\nu))}{4\Gamma(1+m+1/(2\nu)) \Gamma(1+1/(2\nu))} (k\beta_\alpha)^{\alpha-2} + \frac{2^{-2m} \pi \nu^{4m\nu} \Gamma(-2m\nu)}{\Gamma(m) \Gamma(1+m) \Gamma(2m\nu)} \times \\ &\times (k\beta_\alpha)^{2m} - \frac{2^{-4m} \pi \nu^{8m\nu} \cos(m\pi) \Gamma(1-m) \Gamma^2(-2m\nu)}{\Gamma(m) \Gamma^2(1+m) \Gamma^2(2m\nu)} (k\beta_\alpha)^{4m} + \\ &+ \frac{2^{-2m+4\nu} \pi^{3/2} \nu^{2+4(1+m)\nu} \Gamma(-2\nu) \Gamma(-2m\nu) \Gamma(1/2+2\nu)}{\Gamma(m) \Gamma(1+m) \Gamma(2m\nu) \Gamma(1-2(m-1)\nu) \Gamma(1+2(1+m)\nu)} \times \\ &\times (\csc(2(m-1)\pi\nu) + \csc(2(m+1)\pi\nu)) (k\beta_\alpha)^{2m+2} + \mathcal{O}((k\beta_\alpha)^\rho). \quad (4.95) \end{aligned}$$

Die Potenz  $\rho$  ist die Ordnung des ersten Terms, der nicht in der Entwicklung (4.95) aufgeführt ist bzw. berücksichtigt werden darf. Sie hängt sowohl von der Potenz  $\alpha$  als auch von (dem nicht notwendiger Weise ganzzahligen)  $m > 0$  ab und ist in Tabelle 4.2 aufgeführt.

$\alpha < 2m$	$\alpha = 5$ $\alpha \geq 6$	$3 \leq m$ $m < 3$	$\rho = 5$ $\rho = 7$ $\rho = \alpha + 2$
$\alpha = 2m$			$\rho = 2m + 2$
$2m < \alpha < 2m + 2$	$\alpha = 5$ $\alpha \geq 6$	$m \leq 2$ $2 < m$	$\rho = 5$ $\rho = 7$ $\rho = \alpha + 2$
$2m + 2 < \alpha < 2m + 4$	$\alpha = 5$ $\alpha \geq 6$		$\rho = 2m + 3$ $\rho = 2m + 4$
$2m + 4 < \alpha$		$m < 1$ $m > 1$	$\rho = 2m + 2$ $\rho = \min\{\alpha + 2, 4m, 2m + 4\}$

**Tabelle 4.2:** Die Potenz  $\rho$  ist die Ordnung des ersten Terms, der nicht in der Entwicklung (4.95) aufgeführt ist bzw. berücksichtigt werden darf. Sie hängt sowohl von  $\alpha$  als auch  $m$  ab.

Die kritischen Fälle können wieder leicht als diejenigen identifiziert werden, bei denen die Argumente einiger Gamma-Funktionen in (4.95) Null oder eine negative ganze Zahl sind. Aber auch für diese Fälle können wohldefinierte Ergebnisse gefunden werden, indem wir den jeweiligen Limes bilden, bei dem  $m$  einen kritischen Wert erreicht. Für den kritischen Fall  $m = 1$ , welche der  $p$ -Welle in zwei Dimensionen entspricht, gilt:

$$\tan \delta_1(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -\frac{2}{3}k\beta_3 + \mathcal{O}((k\beta_3)^2) \quad \text{für } \alpha = 3, \quad (4.96)$$

$$\tan \delta_1(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{\pi}{8}(k\beta_4)^2 \ln(k\beta_4) - \frac{\pi}{32}(1 - 8\gamma_E + 8 \ln 2)(k\beta_4)^2 + \mathcal{O}((k\beta_4)^3) \\ \text{für } \alpha = 4, \quad (4.97)$$

$$\tan \delta_1(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{3^{5/3} \pi \Gamma(-2/3)}{108 \Gamma(2/3)}(k\beta_5)^2 + \frac{16}{45}(k\beta_5)^3 + \mathcal{O}((k\beta_5)^4) \quad \text{für } \alpha = 5, \quad (4.98)$$

$$\tan \delta_1(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -\frac{\pi}{8}(k\beta_6)^2 - \frac{\pi}{16}(k\beta_6)^4 \ln((k\beta_6)) - \frac{\pi}{384}(-19 + 36\gamma_E - 24 \ln 2)(k\beta_6)^4 + \\ + \mathcal{O}((k\beta_6)^6) \quad \text{für } \alpha = 6, \quad (4.99)$$

$$\tan \delta_1(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{\pi \nu^{4\nu} \Gamma(-2\nu)}{4 \Gamma(2\nu)}(k\beta_\alpha)^2 - \frac{\pi \nu^{8\nu} \Gamma^2(-2\nu)}{8 \Gamma^2(2\nu)}(k\beta_\alpha)^4 \ln(k\beta_\alpha) + \\ + \frac{\pi \nu^{8\nu} \Gamma^2(-2\nu)}{8 \Gamma^2(2\nu)} \left(1 - \gamma_E + \ln 2 + \pi \nu (\cot(2\pi\nu) + \csc(4\pi\nu)) - \right. \\ \left. - \nu(H_{4\nu} + 2 \ln \nu - 2\Psi(2\nu))\right) (k\beta_\alpha)^4 + \mathcal{O}((k\beta_\alpha)^5) \quad \text{für } \alpha > 6, \quad (4.100)$$

wobei  $H_n$  die harmonische Zahl ist, die durch das Integral

$$H_n = \int_0^1 \frac{1 - x^n}{1 - x} dx \quad (4.101)$$

definiert wird.

Für den kritischen Fall  $\alpha_{\text{crit}} = 2m + 2$  ergibt sich:

$$\begin{aligned} \tan \delta_m(k) &\stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{2^{-1-2m}\pi}{\Gamma^2(1+m)} \ln(k\beta_{2m+2})(k\beta_{2m+2})^{2m} - \frac{2^{-1-2m}\pi}{m\Gamma^2(1+m)} \times \\ &\times \left( (1+m)(\ln(2) - \gamma_E) + m(H_m - 1/2H_{2m}) + \ln m \right) (k\beta_{2m+2})^{2m} - \\ &- \frac{2^{-3-2m}m^{-6-2/m}\pi^{3/2}\Gamma^2(-1/m)\Gamma(-(1+m)/m)}{\Gamma(1/2 - 1/m)\Gamma^2(m)} (k\beta_{2m+2})^{2m+2} + \\ &+ \mathcal{O}((k\beta_{2m+2})^\rho), \end{aligned} \quad (4.102)$$

mit  $\rho = 6$  für  $\alpha = 5$  und  $\rho = 2m + 4$  für  $\alpha \geq 6$ .

Für den kritischen Fall  $\alpha_{\text{crit}} = 2m + 4$  folgt:

$$\begin{aligned} \tan \delta_m(k) &\stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{2^{-2m(2+m)/(1+m)}(1+m)^{-2m/(1+m)}\pi\Gamma(-1+1/(1+m))}{\Gamma(m)\Gamma(m/(1+m))\Gamma(1+m)} (k\beta_{2m+4})^{2m} - \\ &- \frac{2^{-2-2m}\pi}{\Gamma(1+m)\Gamma(2+m)} (k\beta_{2m+4})^{2m+2} \ln(k\beta_{2m+4}) + \frac{2^{-3-2m}\pi}{\Gamma^2(2+m)} \times \\ &\times \left( 3 + \frac{m^2+1}{m} - (2+m)\gamma_E + (2m+4)\ln 2 + 2\ln(1+m) + 2(1+m)\Psi(m) \right. \\ &+ \pi \csc\left(\frac{(m-1)\pi}{m+1}\right) - \Psi\left(\frac{2}{1+m}\right) + \Psi\left(\frac{m}{1+m}\right) + \Psi\left(-1 + \frac{1}{1+m}\right) - \\ &\left. - (1+m)\Psi(2+2m) \right) (k\beta_{2m+4})^{2+2m} + \mathcal{O}((k\beta_{2m+4})^{2m+4}). \end{aligned} \quad (4.103)$$

Für  $\alpha_{\text{crit}} = 3$  und  $m > 0$  reduziert sich Gleichung (4.91) zu:

$$\begin{aligned} \tan \delta_m(k) &\stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{2^{-2m}\pi\Gamma(-2m)}{\Gamma(m)\Gamma(2m)\Gamma(1+m)} (k\beta_3)^{2m} - \frac{2}{4m^2-1} k\beta_3 + \\ &+ \frac{2^{-2m}\sqrt{\pi}\cos(m\pi)\Gamma(-1-2m)\Gamma(1-m)\Gamma(-2m)\Gamma(3/2+m)}{\Gamma^3(2m)\Gamma^2(1+m)} (k\beta_3)^{4m} + \\ &+ \mathcal{O}((k\beta_3)^\rho), \end{aligned} \quad (4.104)$$

mit einem Rest der Ordnung  $\rho = 1$  für  $0 < m < \frac{1}{4}$ ;  $\rho = \frac{3}{2}$  für  $m = \frac{1}{4}$ ;  $\rho = 4m$  für  $\frac{1}{4} < m < \frac{1}{2}$  und  $\rho = 2$ , falls  $m > \frac{1}{2}$  gilt.

Für  $m = \frac{1}{2}$ , dies ist der  $s$ -Wellenbeitrag in drei Dimensionen, gilt (vgl. Gleichung (12') in [27]):

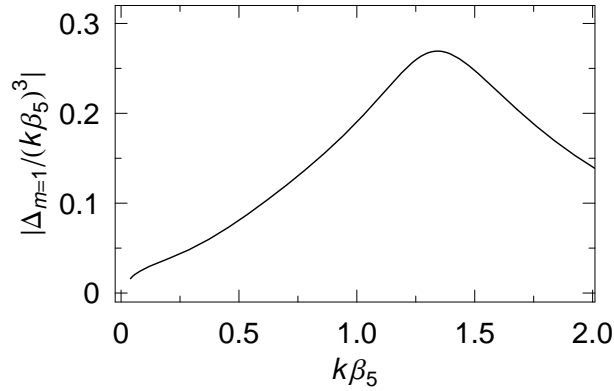
$$\tan \delta_{\frac{1}{2}}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} (k\beta_3) \ln(k\beta_3) + \left( \ln 2 + 3\gamma - \frac{3}{2} \right) (k\beta_3) + \mathcal{O}((k\beta_3)^2).$$

Und abschließend für  $\alpha_{\text{crit}} = 4$ :

$$\begin{aligned} \tan \delta_m(k) &\stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{2^{-4m}\pi\Gamma(-m)}{\Gamma^2(m)\Gamma(1+m)} (k\beta_4)^{2m} - \frac{\pi}{8m(m^2-1)} (k\beta_4)^2 + \\ &+ \frac{2^{-8m}\pi^2 \cot(m\pi)\Gamma(1-m)\Gamma(-m)}{\Gamma^3(m)\Gamma^3(1+m)} (k\beta_4)^{4m} + \mathcal{O}((k\beta_4)^\rho), \end{aligned} \quad (4.105)$$

mit einem Rest der Ordnung  $\rho = 1$  für  $0 < m < \frac{1}{4}$ ;  $\rho = \frac{3}{2}$  für  $m = \frac{1}{4}$ ;  $\rho = 2$  für  $\frac{1}{4} < m < \frac{1}{2}$ ;  $\rho = 4m + 2$  für  $\frac{1}{2} < m < 1$ ;  $\rho = 4$  für  $1 < m \leq \frac{3}{2}$ ;  $\rho = 3$  für  $\frac{3}{2} < m < 2$  und  $\rho = 4$  für  $m \geq 2$ . Der Sonderfall  $m = \frac{1}{2}$  wurde ebenfalls in [27] berechnet (vgl. Gleichung (12')):

$$\begin{aligned} \tan \delta_{\frac{1}{2}}(k) &\stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -(k\beta_4) + \frac{\pi}{3}(k\beta_4)^2 + \frac{4}{3}(k\beta_4)^3 \ln(k\beta_4) + \\ &+ \left( \frac{8}{3}(\gamma_E + \ln 2) - \frac{28}{9} \right) (k\beta_4)^3 + \mathcal{O}((k\beta_4)^4). \end{aligned} \quad (4.106)$$



**Abbildung 4.7:** Differenz (4.109) zwischen der numerisch berechneten Streuphase und dem Ergebnis der analytischen Lösung (4.98) für die Streuung an dem attraktiven Potential proportional zu  $-1/r^5$ . Die Kurve zeigt den Betrag der Differenz (4.109) geteilt durch  $(k\beta_5)^3$ .

Für die attraktiven, singulären Potentiale lösen wir wieder die Schrödinger-Gleichung (4.4) mit einlaufenden Randbedingungen für  $r \rightarrow 0$ . Für  $m > \frac{1}{2}$  ist das Zentrifugalpotential repulsiv und erzeugt eine Potentialbarriere. In diesem Fall handelt es sich nicht um “Quantenreflexion”, sondern um klassisch erlaubte Reflexion (vgl. Abschnitt 2.2). Der Formalismus aus Abschnitt 4.2.2 ist im Wesentlichen unabhängig davon, ob der “Zentrifugalterm” attraktiv oder repulsiv ist, so dass die  $S$ -Matrix in Analogie zu (4.33) durch die komplexe Streuphase  $\delta_m(k)$  beschrieben wird:

$$R_m(k) = -(-1)^m i \frac{\cot \delta_m(k) + i}{\cot \delta_m(k) - i}. \quad (4.107)$$

Für die homogenen Potentiale (4.55) kann das führende Schwellenverhalten von  $\delta_m(k)$  aus den analytischen Ergebnissen der reellen Streuphase für die Streuung an repulsiven Potentialen (4.45) abgeleitet werden, wenn wir (4.58) auf die Ergebnisse anwenden. Zum Beispiel berechnet sich  $\tan \delta_m(k)$  für den kritischen Fall  $\alpha_{\text{crit}} = 4$  aus Gleichung (4.105) zu:

$$\begin{aligned} \tan \delta_m(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} & \frac{2^{-4m} \pi \Gamma(-m)}{\Gamma^2(m) \Gamma(1+m)} (k\beta_4)^{2m} e^{-im\pi} - \frac{\pi}{8m(m^2-1)} (k\beta_4)^2 e^{-i\pi} + \\ & + \frac{2^{-8m} \pi^2 \cot(m\pi) \Gamma(1-m) \Gamma(-m)}{\Gamma^3(m) \Gamma^3(1+m)} (k\beta_4)^{4m} e^{-2im\pi} + \mathcal{O}((k\beta_4)^\rho), \end{aligned} \quad (4.108)$$

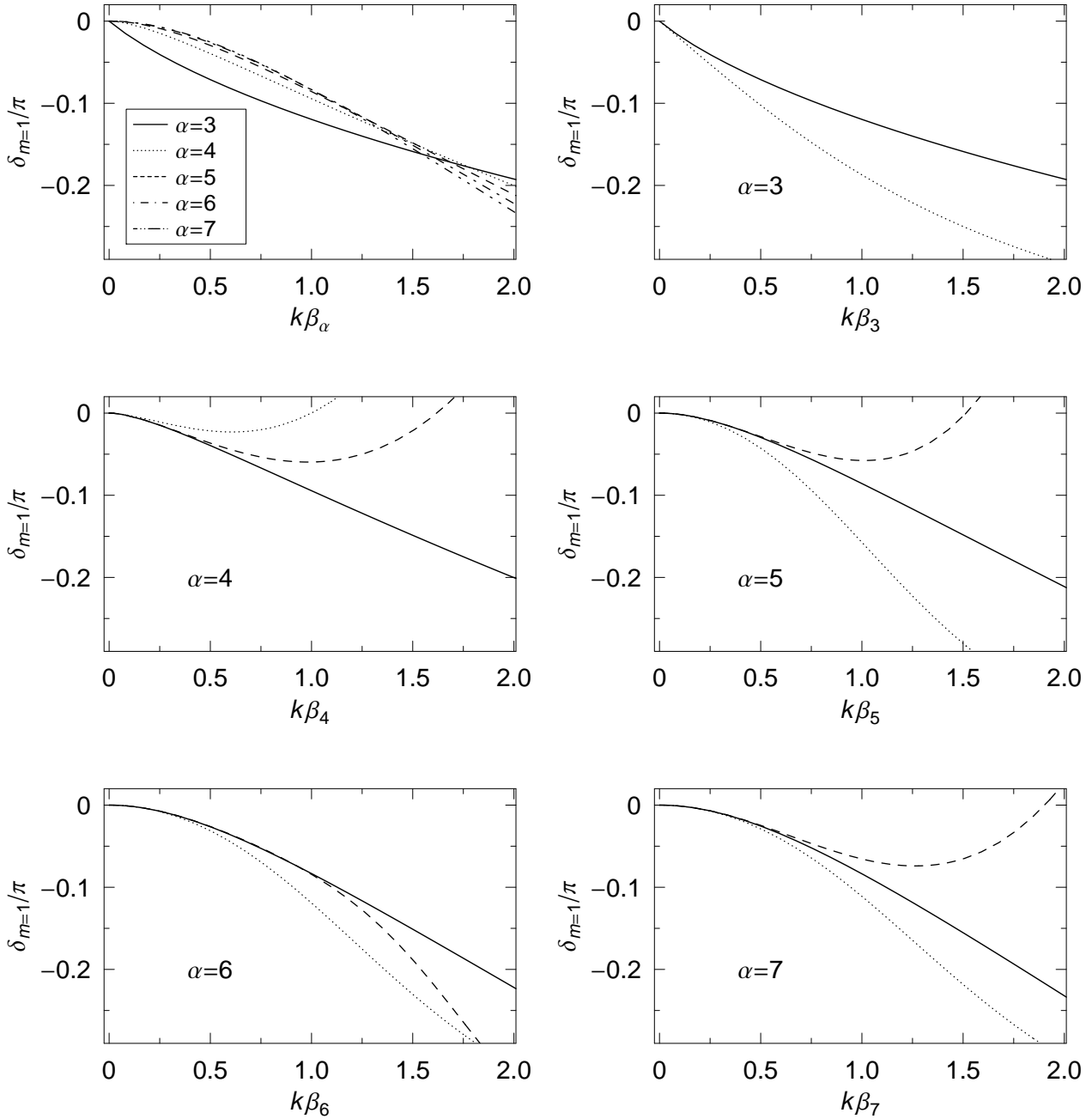
wobei  $\rho$  nach (4.105) definiert ist.

Auch diese Ergebnisse wurden numerisch überprüft. Z.B. zeigt Abbildung 4.7 für den attraktiven Fall mit  $\alpha = 5$  und  $m = 1$  wieder den Betrag der Differenz

$$\Delta_{m=1}(k\beta_5) = \delta_{\text{num}}(k\beta_5) - \delta_{\text{ana}}(k\beta_5) \quad (4.109)$$

geteilt durch  $(k\beta_5)^4$ .

Abbildung 4.8 stellt wie Abbildung 4.2 für  $m = 1$  einen Vergleich zwischen den numerisch berechneten Streuphasen  $\delta_{m=1}(k)$  (durchgezogene Linien) und den Ergebnissen dar, wenn entweder der führende Beitrag (gepunktete Linien) oder alle Terme (gestrichelte Linien) der



**Abbildung 4.8:** Die Streuphase  $\delta_{m=1}(k)$  für die  $p$ -Wellenstreuung am homogenen repulsiven Potential (4.45) in zwei Dimensionen. Das obere linke Bild zeigt die numerisch berechneten Streuphasen für  $\alpha = 3$  bis  $\alpha = 7$ . In den restlichen Bildern, jedes für ein anderes  $\alpha$ , werden die numerischen Ergebnisse (durchgezogene Linien) mit dem führenden Beitrag (gepunktete Linien) bzw. allen Termen der Entwicklungen (4.97) bis (4.100) (gestrichelte Linien) verglichen.



Entwicklungen (4.97) bis (4.100) berücksichtigt werden. Im Gegensatz zu den Beispielen aus den vorherigen Abschnitten verbessern sich die Ergebnisse durch die Hinzunahme von Termen höherer Ordnung von  $k$  für alle  $\alpha$ .

Dieses Verhalten kann allerdings nicht auf die Reflexionswahrscheinlichkeit  $|R_{m=1}(k)|^2$  bzw. auf das Argument  $\arg R_{m=1}(k)$  übertragen werden (vgl. Abbildung 4.9 und 4.10). Während für  $\alpha = 4$  und  $|R_{m=1}(k)|^2$  durch Berücksichtigung aller Terme in (4.97) eine besser Übereinstimmung des Ergebnisses gegenüber dem des führenden Terms erzielt werden kann, gilt diese Aussage nicht mehr für das Argument  $\arg R_{m=1}(k)$ . Hier ist keine Verbesserung erkennbar. Noch deutlicher fällt dieser Vergleich für  $\alpha = 5$  und  $\arg R_{m=1}(k)$  aus: hier wird die numerische Lösung sogar schlechter wiedergegeben, wenn alle Terme in (4.98) berücksichtigt werden.

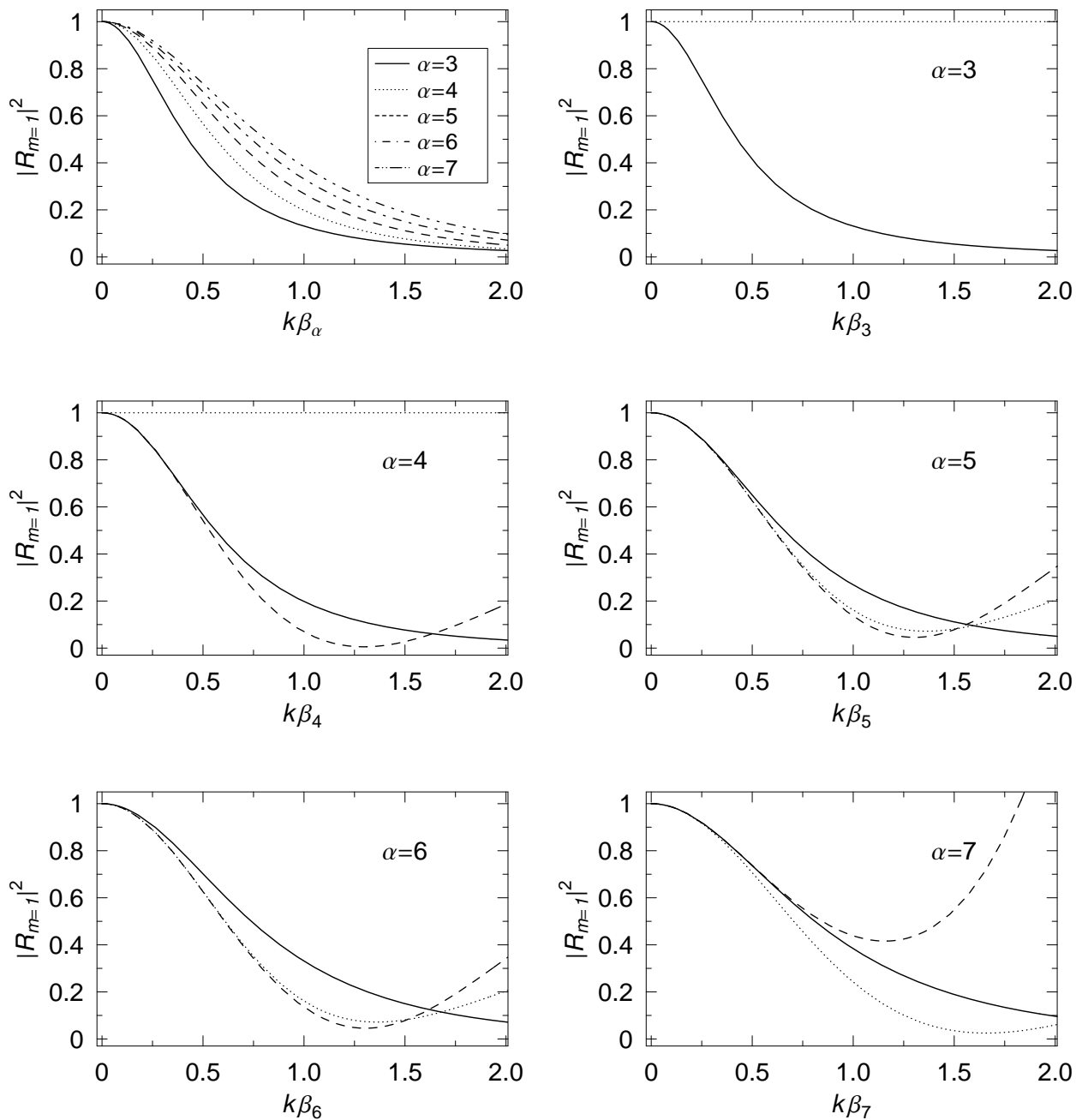
Als letzten Punkt formulieren wir eine effective-range Entwicklung analog zu (3.172) für nicht-verschwindende Drehimpulse, die ausgedrückt durch  $m \equiv l + \frac{1}{2}$  zu

$$k^{2m} \cot(\delta_m(k)) = -\frac{1}{a_m^{2m}} + \frac{1}{2} r_{\text{eff},m}^{2-2m} k^2 \quad (4.110)$$

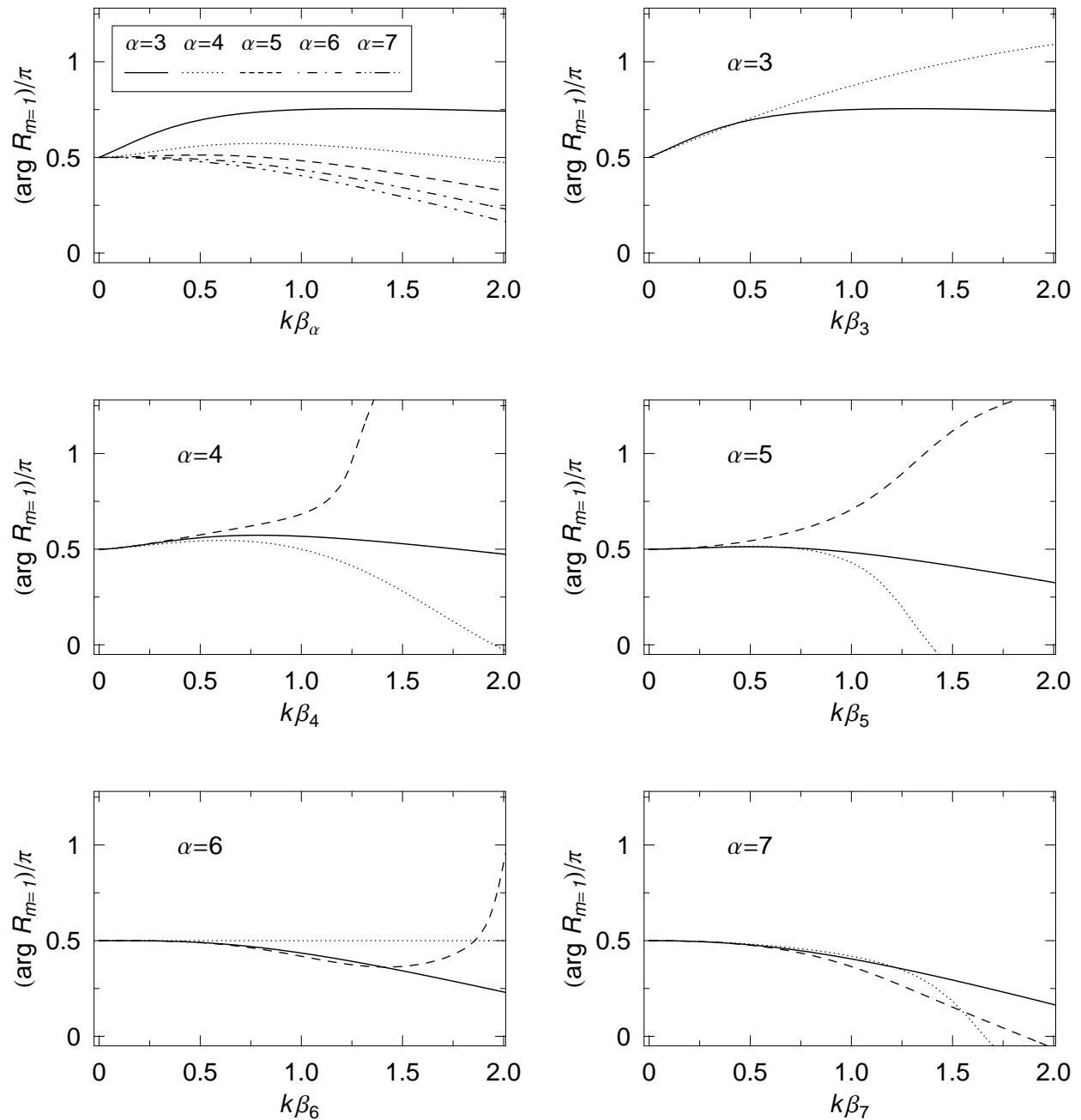
wird. Für die unkritischen Fälle (4.95) von oben erkennen wir, dass diese Gestalt nur gültig bleibt für  $m > 1$ . Für  $m < 1$  tritt ein zusätzlicher Term der Ordnung  $k^{2m}$  auf, der allerdings für  $m = \frac{1}{2}$  verschwindet.

## 4.4 Zusammenfassung der Ergebnisse

In diesem Kapitel wurden die Ideen aus der drei-dimensionalen Streutheorie aus Kapitel 3 wieder aufgegriffen und auf den Fall der Streuung in zwei Dimensionen übertragen. Nach den Grundlagen (Abschnitt 4.1) untersuchten wir das Schwellenverhalten von Streuphasen und entwickelten eine entsprechende effective-range Theorie. Im Gegensatz zum drei-dimensionalen Fall verschwindet der Zentrifugalterm auch für die  $s$ -Wellenstreuung nicht und ist hier sogar attraktiv. Diese Eigenschaft beeinflusst insbesondere das Schwellenverhalten der Streuphase  $\delta_{m=0}(k)$  (bzw.  $\delta_{m=0}(k)$ ), die eine logarithmische Abhängigkeit aufweist (vgl. Gleichung (4.30)). Wie in Abschnitt 3.3 wurde eine effective-range Theorie sowohl für repulsive als auch attraktive Potentiale hergeleitet und für homogene Potentiale  $\pm 1/r^\alpha$  die Streulänge  $a$  (bzw.  $\mathfrak{a}$ ) und die effektive Reichweite  $r_{\text{eff},0}^2$  (bzw.  $\mathfrak{r}_{\text{eff},0}^2$ ) bestimmt. Es konnte wieder ein einfacher Zusammenhang zwischen den reellen und den entsprechenden komplexen Größen gefunden werden. Abschnitt 4.3 behandelte höhere Drehimpulsquantenzahlen  $m$ . Hier wurden die führenden Beiträge zur reellen Streuphase  $\delta_m(k)$  (bzw. zur komplexen  $\delta_m(k)$ ) mit der Theorie aus Abschnitt 3.4 bestimmt. Die Ergebnisse sind so allgemein gehalten, dass sie nicht auf ganz- bzw. halbzahlige Werte von  $m$  beschränkt sind.



**Abbildung 4.9:** Wahrscheinlichkeit  $|R_{m=1}(k)|^2$  für die Reflexion an der  $p$ -Wellen-Zentrifugalbarriere am homogenen attraktiven Potential (4.55) in zwei Dimensionen. Das obere linke Bild zeigt die numerisch berechneten Streuphasen für  $\alpha = 3$  bis  $\alpha = 7$ . In den restlichen Bildern, jedes für ein anderes  $\alpha$ , werden die numerischen Ergebnisse (durchgezogene Linien) mit dem führenden Beitrag (gepunktete Linien) bzw. allen Termen der Entwicklungen (4.97) bis (4.100) (gestrichelte Linien) verglichen.



**Abbildung 4.10:** Argument  $\arg R_{m=1}(k)$  für die Reflexion an der  $p$ -Wellen-Zentrifugalbarriere am homogenen attraktiven Potential (4.55) in zwei Dimensionen. Das obere linke Bild zeigt die numerisch berechneten Ergebnisse für  $\alpha = 3$  bis  $\alpha = 7$ . In den restlichen Bildern, jedes für ein anderes  $\alpha$ , werden die numerischen Ergebnisse (durchgezogene Linien) mit dem führenden Beitrag (gepunktete Linien) bzw. allen Termen der Entwicklungen (4.97) bis (4.100) (gestrichelte Linien) verglichen.



# Kapitel 5

## Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit haben wir das Schwellenverhalten von Streuphasen in attraktiven, singulären Potentialen proportional zu  $-1/r^\alpha$ ,  $\alpha > 2$ , in zwei und drei Dimensionen untersucht. Derartige Potentiale treten in Atom-Atom-Wechselwirkungen sowie bei der Wechselwirkung zwischen Atomen und Oberflächen, wie z.B. bei der Streuung von Atomen an einer Wand, Kugel oder einem Nanoröhrchen auf. Totale Absorption an der Oberfläche wurde durch einlaufende Randbedingung in Form von WKB-Wellen beschrieben, so dass die Streuphase  $\delta(k)$  wegen des Teilchenverlustes eine komplexe Größe und die  $S$ -Matrix nicht länger unitär ist. Durch diese Randbedingungen können die Streuphasen  $\delta(k)$  auf eine eindeutige und modellunabhängige Weise auch für attraktive, singuläre Potentiale definiert werden, ohne dass weitere Annahmen für das im Allgemeinen nicht zugängliche Potential für kleine Abstände  $r$  getroffen werden müssen. Die Aussagen zum Schwellenverhalten von Streuphasen an repulsiven Potentialen sind auf die Streuung an attraktiven Potentialen übertragbar. Um dies zu zeigen, haben wir zunächst die aus der gewöhnlichen elastischen Streuung in drei Dimensionen bekannte effective-range Theorie auf den Fall der Quantenreflexion an attraktiven Potentialen erweitert. Dies führte zu den einfachen Formeln (3.70) bzw. (3.73) für den führenden und nächsthöheren Term des Schwellenverhaltens der komplexen Streuphase, dessen Real- und Imaginärteil nach (3.22) die Phase und den Betrag der Quantenreflexionsamplitude  $R_{l=0}(k)$  bestimmen. Für Potentiale, die asymptotisch schneller abfallen als  $-1/r^3$ , ist der führende Beitrag der komplexen Streuphase  $\delta_{l=0}(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} -\mathcal{A}k$ .  $\mathcal{A} = \bar{a} - ib$  ist die komplexe Streulänge (3.32), deren Real- und Imaginärteil durch die mittlere Streulänge  $\bar{a}$  und die Schwellenlänge  $b$  des Potentialschwanzes dargestellt werden. Für Potentiale, die schneller abfallen als  $-1/r^5$ , ist der Term in der nächsthöheren Ordnung proportional zu  $k^3$  – vgl. (3.73), und wird durch eine komplexe effektive Reichweite  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}$  (3.71) bestimmt.  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}$  wird vollständig durch die Lösungen der Schrödinger-Gleichung bei der Energie  $E = 0$  beschrieben, die einlaufenden Randbedingungen im semiklassischen Gebiet für  $r \rightarrow 0$  genügen. Auch wenn die Lösung bei  $E = 0$  analytisch nicht bekannt ist, kann  $\mathcal{A}$  und  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}$  berechnet werden, wenn die Schrödinger-Gleichung numerisch bei  $E = 0$  gelöst wird. Hieraus ergeben sich die Parameter für das Schwellenverhalten der komplexen Streuphase bis einschließlich der Ordnung  $\mathcal{O}(k^3)$ , solange das Potential schneller abfällt als  $-1/r^5$ . Für attraktive homogene Potentialschwänze, also diejenigen, deren Abweichung von homogenen Potentialen im nichtklassischen Gebiet vernachlässigbar sind, sind sowohl die komplexe Streulänge  $\mathcal{A}_\alpha$  als auch die effektive Reichweite  $\mathcal{R}_{\text{eff},0}$  proportional zu dem Längenparameter  $\beta_\alpha$ , der die Stärke des Potentials beschreibt, vgl. (3.50) und (3.89).

Das Schwellenverhalten der Streuphasen für homogene Potentiale und beliebige Drehimpulsquantenzahlen  $l \geq 0$  wurde im Abschnitt 3.4 behandelt. Für Potentiale der Form  $-1/r^\alpha$ ,  $\alpha > 2$ , konnten wir die führenden Beiträge zu  $\delta_l(k)$  mit Hilfe von den Jost-Lösungen  $f_\pm(k, r)$ , (3.107), und den Jost-Funktionen  $\mathcal{F}_\pm(k)$ , (3.114), aus einer geeigneten Matching-Methode

(3.112) herleiten. Die Entwicklungen der Jost-Lösungen (3.156) bzw. (3.165) wurden aus einer Volterra-Gleichung (3.142) iterativ bestimmt und daraus die Entwicklungen (3.157) bzw. (3.166) der WKB-Wellenfunktionen gewonnen. Für  $l = 0$  stimmen die Ergebnisse von  $\delta_{l=0}(k)$  mit denen aus der effective-range Theorie in Abschnitt 3.3 überein (für  $\alpha = 6$  konnte ein zusätzlicher Term Ordnung  $k^4$  bestimmt werden), beinhalten aber auch das Schwellenverhalten der Streuphasen für  $\alpha < 6$ . Der einfache Zusammenhang zwischen der reellen und komplexen Streulänge (3.106) bzw. der reellen und komplexen effektiven Reichweite (3.105) aus Abschnitt 3.3 konnte auch für höhere Drehimpulsquantenzahlen  $l$  bestätigt werden. Das repulsive Potential  $V^{\text{rep}}(r) = +\beta_\alpha^{\alpha-2}/r^\alpha$  wird zu einem attraktiven  $V^{\text{att}}(r) = -\beta_\alpha^{\alpha-2}/r^\alpha$ , wenn wir den Längenparameter  $\beta_\alpha$  durch  $\beta_\alpha e^{-i\pi\nu}$  ersetzen. Dies bewirkt, dass die regulären Lösungen  $u_{\text{reg}}$  in einlaufende Randbedingungen transformiert werden und wir erhalten die komplexe Streuphase  $\delta_l(k)$  aus der Entwicklung der reellen  $\delta_l(k)$ . Diese Aussage gilt auch für die Streulänge bzw. effektive Reichweite, allerdings nur dann, wenn beide Größen so definiert sind, dass sie die Dimension einer Länge haben.

Als Anwendungsbeispiel untersuchten wir das Streuverhalten ultrakalter Atome an einer absorbierenden Kugel mit einem Radius im Nanometer-Bereich, bei dem der Teilchenverlust (auf Grund von inelastischen Reaktionen und Absorption) durch einlaufende Randbedingungen beschrieben wird, die im semiklassischen Gebiet nahe der Oberfläche der Kugel durch WKB-Wellen dargestellt werden können. Die Parameter wurden so gewählt, dass sie denen von metastabilen Helium ( $2^3S$ )-Atomen bzw. Natrium-Atomen im Grundzustand und einem Radius der Kugel von  $R_K = 200$  bzw.  $2000$  a.u. entsprechen. Zwei verschiedene Shape-Funktionen (3.187) wurden zur Beschreibung der Form des Atom-Kugel Potentials in der Übergangszone vom nicht-retardierte van der Waals-Regime für vergleichsweise kleine Atom-Oberflächen-Abstände und dem hoch retardierten Casimir-Regime bei großen Abständen verwendet. Um die Ergebnisse aus Abschnitt 3.5.3 interpretieren zu können, ist es notwendig, die charakteristischen Längen  $\beta_6$  und  $\beta_7$  der ihnen assoziierten Stärkeparameter  $C_6$  und  $C_7$  richtig zu beurteilen. Diese Längen stehen im Zusammenhang mit den Längen  $\beta_3$  und  $\beta_4$  für eine flache Wand und sind vom Radius  $R_K$  der Kugel in einfacher Weise abhängig (3.194). Durch eine Variation von  $R_K$  können die charakteristischen Längen so verändert werden, dass sie entweder im nicht-retardierte van der Waals-Regime, im hoch retardierten Casimir-Regime oder in der Übergangszone dazwischen liegen. Somit bietet die Streuung ultrakalter Atome an Nanokugeln eine transparente, empfindliche und flexible Möglichkeit, um Atom-Oberflächen-Potentiale zu untersuchen.

Das abschließende Kapitel gibt eine Übersicht über die Streuung an einem zirkular-symmetrischen Potential in zwei Dimensionen. Im Gegensatz zum ein- und drei-dimensionalen Fall enthält die Schrödinger-Gleichung (4.4) einen Zentrifugalterm  $\hbar^2 (m^2 - \frac{1}{4}) / (2\mathcal{M}r^2)$ , der auch für  $s$ -Wellen ( $m = 0$ ) nicht verschwindet. Diese Eigenschaft beeinflusst insbesondere die Schwellenlösungen bei  $E = 0$  (vgl. 4.7c) und führt im Limes  $k \rightarrow 0$  zu einer logarithmischen Abhängigkeit der Streuphase, (4.18) und (4.35). Trotz dieser Unterschiede kann die effective-range Theorie aus der drei-dimensionalen Streutheorie auf die Streuung in zwei Dimensionen erweitert werden, wenn wir eine geeignete Streulänge (für Potentiale, die schneller abfallen als  $1/r^2$ ) und eine effektive Reichweite (für Potentiale, die schneller abfallen als  $1/r^4$ ) definieren. Bei der Streuung an einem repulsiven Potential ist – im Gegensatz zum drei-dimensionalen Fall – die Streulänge  $a$  (4.19b) immer positiv, solange kein gebundener Zustand genau an der Schwelle liegt. Das Quadrat der reellen effektiven Reichweite,  $r_{\text{eff},0}^2$  (4.31), kann hingegen negativ sein. Die effective-range Theorie lässt sich auch auf die Situation der Quantenreflexion an attraktiven Potentialen mit einlaufenden Randbedingungen übertragen. Das Schwellenverhalten der komplexen Streuphase  $\delta_{m=0}(k)$  wird bis einschließlich der Ordnung  $\mathcal{O}(k^3)$  durch die komplexe Streulänge  $\alpha$  (4.34) und dem Quadrat der komplexen effektiven Reichweite  $\mathbf{r}_{\text{eff},0}^2$  (4.35) bestimmt. Für die homogenen Potentiale (4.45) und (4.55) existiert

der gleiche Zusammenhang wie in drei Dimensionen und mit der Transformation (3.101) erhalten wir die komplexen Größen aus den jeweiligen reellen. Für diese Potentiale lassen sich analytische Ausdrücke finden (vgl. (4.49), (4.53), (4.57) und (4.64)). Eine modifizierte effective-range Entwicklung kann für das homogene  $\pm 1/r^4$ -Potential mit Hilfe der Mathieu-Funktionen (4.75) gefunden werden und liefert die entsprechende Entwicklung für diesen Sonderfall (4.81), (4.85).

Um die Ergebnisse zu vervollständigen, haben wir die führenden Beiträge zur Streuphase für beliebige (nicht notwendigerweise ganz- oder halbzahlige) Werte von  $m$  mit Hilfe der Jost-Funktionen für attraktive und repulsive Potentiale hergeleitet.

Obwohl die Streuung von ultrakalten Atomen an gekrümmten Oberflächen ein komplizierter Prozess sein kann, zeigen die in dieser Arbeit dargestellten Ergebnisse, wie aus Streuexperimenten mehr Informationen über Wechselwirkungspotentiale gewonnen werden können – im Vergleich zur Streuung von Atomen an einer Wand. Dies liefert einen ersten Ansatzpunkt für weitere Untersuchungen. Ein Parameter, der bisher gänzlich vernachlässigt wurde, ist die Temperatur des Targets und der Umgebung. Für die Streuung an einer Wand treten zusätzliche Terme im Potential auf [108], die eine weitere Möglichkeit liefern, um das Streuverhalten der Atome zu beeinflussen. Erste Erklärungsversuche und Folgen – insbesondere für den Einfluss der Temperatur auf die Quantenreflexion – wurden bereits gegeben [58, 109]. Neben der Temperatur spielt auch die Oberfläche des Targets eine entscheidende Rolle. Experimente an strukturierten Oberflächen sind möglich, Aussagekraft und Grenzen dieser Ergebnisse aber noch nicht ausreichend untersucht [17, 49]. Auch die Streuung an einem Nanoröhrchen ist von großem Interesse. Allerdings ist die Form des Potentials, das eine derartige Wechselwirkung beschreibt, bisher noch nicht eindeutig geklärt [110, 111]. Es ist zu vermuten, dass der Radius des Röhrchens als ein weiterer Parameter zur Untersuchung und Beeinflussung des Potentials dienen kann, vergleichbar zum Radius der Kugel aus Abschnitt 3.5. Insgesamt bietet die Streuung ultrakalter Atome an Oberflächen viele Möglichkeiten, um die Grundlagen der Wechselwirkung von Atomen mit Oberflächen zu untersuchen, deren Verständnis Grundvoraussetzung für eine Anwendung in den verschiedensten Gebieten der Physik, wie z.B. der Quanteninformation, Oberflächen- bzw. Festkörperphysik, ist.





# Anhang A

## Integralgleichungen als Lösungen von Differentialgleichungen

Die Grundlage fast aller physikalischen Theorien sind Differentialgleichungen, für die in den meisten Fällen noch keine analytischen Lösungen bekannt sind. Numerische Verfahren jedoch haben den Nachteil, dass sie nicht immer eine ausreichende Genauigkeit der Lösungen gewährleisten können. Deshalb ist es sinnvoll, nach analytischen Näherungen der Lösungen von Differentialgleichungen zu suchen, wobei die verwendeten Verfahren sehr stark von der Art der Differentialgleichung abhängen.

Die für diese Arbeit interessante Gleichung gehört zu der Klasse der linearen, inhomogenen, gewöhnlichen Differentialgleichung  $n$ -ter Ordnung,

$$y^{(n)}(r) + a_{n-1}(r)y^{(n-1)}(r) + \cdots + a_1(r)y'(r) + a_0(r)y(r) = b(r), \quad (\text{A.1})$$

mit der zugehörigen homogenen Gleichung

$$y^{(n)}(r) + a_{n-1}(r)y^{(n-1)}(r) + \cdots + a_1(r)y'(r) + a_0(r)y(r) = 0 \quad (\text{A.2})$$

und stetigen Funktionen  $a_i(r)$ .<sup>1</sup> Nach dem *Struktursatz für lineare Differentialgleichungen* (z.B. [112]), ist die Lösung  $y(r)$  von Gleichung (A.1) eine Linearkombination aus einer Lösung  $y_h(r)$  der homogenen Gleichung (A.2) und einer speziellen Lösung  $y_s(r)$  der inhomogenen Gleichung (A.1),

$$y(r) = y_s(r) + y_h(r). \quad (\text{A.3})$$

Zur Bestimmung der speziellen Lösung  $y_s(r)$  verwenden wir den Ansatz der *Variation der Konstanten*, der immer – bis auf Integration – zu einem Ergebnis führt, solange eine Lösungsbasis  $(y_1(r), \dots, y_n(r))$  der homogenen Differentialgleichung gefunden ist. Wir wählen für die spezielle Lösung  $y_s(r)$  den Ansatz

$$y_s(r) = C_1(r)y_1(r) + \cdots + C_n(r)y_n(r) \quad (\text{A.4})$$

mit den unbestimmten Funktionen  $C_i(r)$  und fordern zusätzlich

$$\begin{aligned} 0 &= C_1'(r)y_1(r) + \cdots + C_n'(r)y_n(r) \\ 0 &= C_1'(r)y_1'(r) + \cdots + C_n'(r)y_n'(r) \\ &\vdots \\ 0 &= C_1'(r)y_1^{(n-2)}(r) + \cdots + C_n'(r)y_n^{(n-2)}(r). \end{aligned}$$

<sup>1</sup>Wir halten uns nicht strikt an die Definitionen (A.1) bzw. (A.2); das Störglied  $b(r)$  kann auch Terme beinhalten, welche die Funktion  $y(r)$  selbst, jedoch keine Ableitung der gesuchten Funktion enthalten.

Das Einsetzen von (A.4) in (A.1) liefert eine zusätzliche Gleichung

$$b(r) = C'_1(r)y_1^{(n-1)}(r) + \cdots + C'_n(r)y_n^{(n-1)}(r),$$

so dass wir zusammen mit den obigen  $n - 1$  Gleichungen insgesamt ein inhomogenes lineares  $(n \times n)$ -Gleichungssystem für die Ableitungen  $C'_j(r)$  gefunden haben. Dieses Gleichungssystem ist eindeutig lösbar, da die Koeffizientenmatrix gerade die Wronski-Matrix darstellt und die Determinante dieser Matrix für ein Fundamentalsystem von Lösungen ungleich Null ist. Mit Hilfe der Cramerschen Regel kann nun die Lösung bis auf Integration angegeben werden:

$$y_s(r) = \sum_{j=1}^n \left[ (-1)^{n+j} y_j(r) \int_{r_0}^r \frac{W_j(r')}{W(r')} b(r') dr' \right], \quad (\text{A.5})$$

wobei  $W(r)$  die zugehörige Wronski-Determinante des Fundamentalsystems  $(y_1(r), \dots, y_n(r))$  der Gleichung (A.2) ist,

$$W(y_1(r), \dots, y_n(r)) \stackrel{\text{Def.}}{=} W(r) = \det \begin{pmatrix} y_1(r) & \cdots & y_n(r) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ y_1^{(n-1)}(r) & \cdots & y_n^{(n-1)}(r) \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

und  $W_j(r)$  diejenige Determinante beschreibt, die man durch Streichen der  $j$ -ten Spalte und  $n$ -ten Zeile von  $W(r)$  erhält.

Integralgleichungen haben gegenüber Differentialgleichungen den Vorteil, dass sie beliebig genau lösbar sind [113], weshalb Differentialgleichungen häufig mit Hilfe einer *Green's-Funktion*  $G(r, r')$  auf Integralgleichungen zurückgeführt werden. Das Problem bei diesem Verfahren liegt allerdings darin, zunächst die Funktion  $G(r, r')$  zu bestimmen, die als Lösung der Gleichung

$$\left( \frac{d^n}{dr^n} + a_{n-1}(r) \frac{d^{n-1}}{dr^{n-1}} + \cdots + a_0(r) \right) G(r, r') = \delta(r - r'), \quad (\text{A.7})$$

definiert wird. Sie erleichtert es, eine spezielle Lösung  $y_s(r)$  mit der Gleichung

$$y_s(r) = \int_{r_0}^r G(r, r') b(r') dr' \quad (\text{A.8})$$

zu finden. Vergleichen wir diesen Ausdruck mit (A.5), können wir  $G(r, r')$  ablesen:

$$G(r, r') = \sum_{j=1}^n (-1)^{n+j} y_j(r) \frac{W_j(r')}{W(r')} b(r') \quad \text{für } r' > r. \quad (\text{A.9})$$

Die für uns interessante Differentialgleichung ist die radiale Schrödinger-Gleichung mit einem Potential  $V(r)$ , für die  $n = 2$  gilt:

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) y(r) = 0. \quad (\text{A.10})$$

In diesem Fall nimmt Gleichung (A.9) die einfache Form

$$G(r, r') = \begin{cases} 0 & \text{für } r' < r, \\ \frac{y_1(r')y_2(r) - y_1(r)y_2(r')}{W(y_1(r'), y_2(r'))} & \text{für } r' > r, \end{cases} \quad (\text{A.11})$$

an [114].  $y_1(r)$  und  $y_2(r)$  sind die Lösungen der zugeordneten homogenen Gleichung

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) y_h(r) = 0, \quad (\text{A.12})$$

deren Lösungen die Bessel-Funktionen  $J_\mu$  und Neumann-Funktionen  $Y_\mu$  (bzw. die Hankel-Funktionen  $H_\mu^{(1,2)}$ ) der Ordnung  $\mu = l + 1/2$  und dem Argument  $kr$  sind:

$$y_h(r) = A\sqrt{r}J_\mu(kr) + B\sqrt{r}Y_\mu(kr). \quad (\text{A.13})$$

Die Koeffizienten  $A, B$  sind beliebig und werden durch die Randbedingungen bestimmt. Die Green's Funktion (A.11) lautet in diesem Fall

$$G(r, r') = \begin{cases} 0 & \text{für } r' < r, \\ \sqrt{rr'} \frac{J_\mu(kr')Y_\mu(kr) - J_\mu(kr)Y_\mu(kr')}{W(\sqrt{r'}J_\mu(kr'), \sqrt{r}Y_\mu(kr'))} & \text{für } r' > r, \end{cases} \quad (\text{A.14})$$

und somit ist die Lösung von (A.10):

$$y(r) = A\sqrt{r}J_\mu(kr) + B\sqrt{r}Y_\mu(kr) + \int_{r_0}^r G(r, r')V(r')y(r')dr'. \quad (\text{A.15})$$

Diese Gleichung ist eine *Volterra-Gleichung*, da die gesuchte Funktion  $y(r)$  Teil des Integral-kerns ist. Sie kann mit dem Ansatz

$$y(r) = \sum_i y_i(r), \quad (\text{A.16a})$$

$$y_0(r) = y_h(r), \quad (\text{A.16b})$$

$$y_n(r) = \int_{r_0}^r G(r, r')V(r')y_{(n-1)}(r')dr', \quad n \geq 1 \quad (\text{A.16c})$$

gelöst werden.<sup>2</sup>

Alternativ kann auch der Term  $\left(-\frac{l(l+1)}{r^2} + V(r)\right)y(r)$  als Störglied der Gleichung (A.10) aufgefasst werden, so dass die allgemeine Lösung der assoziierten homogenen Differentialgleichung

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right) y_h(r) = 0, \quad (\text{A.17})$$

eine Linearkombination aus Sinus- und Kosinus-Funktionen ist und sich die Green's Funktion zu

$$G(r, r') = \begin{cases} 0 & \text{für } r' < r, \\ \frac{\sin(k(r-r'))}{k} & \text{für } r' > r, \end{cases} \quad (\text{A.18})$$

vereinfacht. Allerdings muss jetzt Gleichung (A.15) durch

$$y(r) = A \sin(kr) + B \cos(kr) + \int_{r_0}^r \frac{\sin(k(r-r'))}{k} \left( -\frac{l(l+1)}{r'^2} + V(r') \right) y(r')dr' \quad (\text{A.19})$$

ersetzt werden und wir erhalten für die iterative Lösung folgende Gleichung:

$$y_n(r) = \int_{r_0}^r G(r, r') \left( -\frac{l(l+1)}{r'^2} + V(r') \right) y_{(n-1)}(r')dr', \quad n \geq 1. \quad (\text{A.20})$$

An dieser Stelle sei noch erwähnt, dass  $G(r, r')$  unabhängig von den Randbedingungen der Differentialgleichung ist, die lediglich die Koeffizienten  $A$  und  $B$  bestimmen.

<sup>2</sup>Die Konvergenz dieser Iteration muss hierbei im Einzelnen geprüft werden.



# Anhang B

## Wechselwirkung von Atomen mit Oberflächen

Die Wechselwirkung von Atomen mit Oberflächen ist theoretisch sehr schwer zu beschreiben. Nahe der Oberfläche spielt die mikroskopische Struktur der Oberfläche und der Atome sowie die Wechselwirkung zwischen den beteiligten Elektronen eine entscheidende Rolle. Um ein exaktes Potential zu bestimmen, muss ein Viel-Teilchen-Problem gelöst werden, das ohne weitere Annahmen analytisch nicht zugänglich ist. Dennoch kann für einfache Systeme wie z.B. die Streuung von polarisierbaren Atomen an einer leitenden Wand bzw. einer leitenden Kugel das asymptotische Verhalten des Wechselwirkungspotentials für kleine Abstände ( $r \rightarrow 0$ ) – aber jenseits dieses Nahbereiches, an dem komplizierte Reaktionen stattfinden können – und für große Abstände  $r \rightarrow \infty$  hergeleitet werden. Im Zwischenbereich ist das Wechselwirkungspotential im Allgemeinen nicht bekannt.

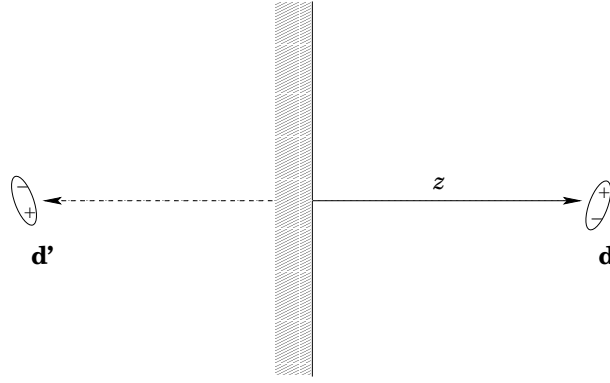
### B.1 Atom-Wand-Wechselwirkung

Ein System, in dem das Wechselwirkungspotential relativ einfach bestimmt werden kann, ist jenes zwischen einem neutralen, polarisierbaren Atom und einer perfekt leitenden Wand. Hierfür nutzen wir die aus der Elektrodynamik bekannte Methode der Spiegelladung, die ausführlich in [72] beschrieben wird. Betrachten wir ein polarisierbares Atom im Abstand  $z > 0$  in der  $xy$ -Ebene von der Wand, die im linken Halbraum liegt ( $z \leq 0$ ). Durch das Atom wird eine Ladung auf der Oberfläche der Wand induziert und erzeugt ein elektrisches Feld, das dem einer Spiegelladung entspricht, die sich an der Stelle  $-z$  im linken Halbraum befindet. Für ein elektrisch neutrales Teilchen ist der führende Beitrag das Dipolmoment  $\mathbf{d}$ , welches die Spiegelladung  $\mathbf{d}'$  erzeugt (vgl. Abbildung B.1) und folgendes Potential hervorruft [115]:

$$V = \frac{1}{A^3} (\mathbf{d} \cdot \mathbf{d}' - 3(\mathbf{e} \cdot \mathbf{d})(\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}')) . \quad (\text{B.1})$$

$A = 2z$  ist der Abstand der zwei Dipole und  $\mathbf{e}$  ist der Einheitsvektor, der von einem Dipol in die Richtung des anderen zeigt (in diesem Beispiel der Einheitsvektor senkrecht zur Wand). Für die Dipolmomente folgt aus der geometrischen Anordnung, dass für die Komponenten senkrecht zur Wand gilt:  $d'_{\perp} = d_{\perp}$  und für die Projektion in die  $xy$ -Ebene parallel zur Wand:  $\mathbf{d}'_{\parallel} = -\mathbf{d}_{\parallel}$ . Dies ergibt das elektrostatische *van der Waals-Potential* zwischen einem neutralen, polarisierbaren Teilchen und einer leitenden Wand

$$V^{\text{vdW}}(z) = -\frac{1}{16z^3} \left( (\mathbf{d}_{\parallel})^2 + 2(d_{\perp})^2 \right) , \quad (\text{B.2})$$



**Abbildung B.1:** Schematische Darstellung der Spiegelladungsmethode.

wobei zu beachten ist, dass das elektrische Feld im linken Halbraum auf Grund der Randbedingungen verschwindet und das Potential somit nur die Hälfte des Potentials dieses Dipol-Dipol-Systems ist.

Für ein quantenmechanisches Teilchen im stationären, elektronischen Eigenzustand  $\psi_0$  erhalten wir für das van der Waals-Potential:

$$V^{\text{vdW}}(z) = -\frac{C_3}{z^3}, \quad C_3 = \frac{1}{16} \langle \psi_0 | (\hat{\mathbf{d}}_{\parallel})^2 + 2 (\hat{\mathbf{d}}_{\perp})^2 | \psi_0 \rangle. \quad (\text{B.3})$$

$\hat{\mathbf{d}}$  steht jetzt für den Dipol-Operator der  $Z$  Elektronen des Atoms

$$\hat{\mathbf{d}} = -e \sum_{i=1}^Z \vec{r}_i. \quad (\text{B.4})$$

Für ein Atom in einem sphärischen Zustand ist der Erwartungswert von  $(\hat{\mathbf{d}}_{\parallel})^2$  gerade zweimal der Wert von  $(\hat{\mathbf{d}}_{\perp})^2$ . Somit ist der Stärkeparameter  $C_3$ :

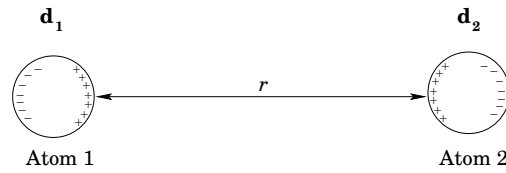
$$C_3 = \frac{1}{12} \langle \psi_0 | \hat{\mathbf{d}}^2 | \psi_0 \rangle = \frac{1}{12} \sum_n \langle \psi_0 | \hat{\mathbf{d}} | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{\mathbf{d}} | \psi_0 \rangle. \quad (\text{B.5})$$

Die Summe auf der rechten Seite enthält einen kompletten Satz von Eigenfunktionen und drückt die Potentialstärke als eine Summe von allen Beiträgen der Dipolübergänge vom Grundzustand in alle angeregten Zustände aus.

Für sehr große Abstände  $z$  des Atoms zur Wand ist diese einfache Formel nicht mehr anwendbar, da die Endlichkeit der Lichtgeschwindigkeit berücksichtigt werden muss. Casimir und Polder zeigten [19], dass die elektrostatische Formel (B.3) nur dann zutreffend ist, wenn der Abstand  $z$  kleiner als die nicht-verschwindenden Matrixelemente wird, die zur Summe beitragen. Für Abstände, die größer sind als die entsprechenden Übergangswellenlängen des Atoms, wird die Übergangszeit kleiner als die Zeit, die das Lichtsignal braucht um zwischen dem Atom und der Wand hin und her zu wandern. Das Potential ändert sich durch die Drehung des Dipols. Diese *Retardierungseffekte* hängen stark davon ab, ob sich das Atom im Grund oder in einem angeregten Zustand befindet. Ebenso spielt die Leitfähigkeit der Wand eine große Rolle.

Weicht die Leitfähigkeit nur gering von der einer perfekt leitenden Wand ab und kann mit einer festen dielektrischen Konstante  $\epsilon$  beschrieben werden, so lässt sich das Wechselwirkungspotential in der Form (in atomaren Einheiten)

$$V_{\epsilon}(z) = -\frac{(\alpha_{\text{fs}})^3}{2\pi} \int_0^{\infty} \alpha_{\text{d}}(i\omega) \omega^3 \int_1^{\infty} \exp(-2\omega z p \alpha_{\text{fs}}) h(p, \epsilon) dp d\omega \quad (\text{B.6})$$



**Abbildung B.2:** Dipol-Dipol-Wechselwirkung zwischen zwei Atomen.

darstellen, mit der Feinstrukturkonstante  $\alpha_{\text{fs}}$ , der frequenzabhängigen Dipolpolarisierbarkeit  $\alpha_{\text{d}}$  des Projektils und

$$h(p, \epsilon) = \frac{s-p}{s+p} + (1-2p^2) \frac{s-\epsilon p}{s+\epsilon p} \quad \text{und} \quad s = \sqrt{\epsilon - 1 + p^2}, \quad (\text{B.7})$$

[116, 117].

Für eine perfekt leitende Wand ( $\epsilon \rightarrow \infty$ ) integrieren wir in (B.6) über  $p$

$$V_{\infty}(z) = -\frac{1}{4\pi z^3} \int_0^{\infty} \alpha_{\text{d}}(i\omega) (1 + 2\alpha_{\text{fs}}\omega z + 2(\alpha_{\text{fs}}\omega z)^2) \exp(-2\alpha_{\text{fs}}\omega z) d\omega, \quad (\text{B.8})$$

und können für kleine Abstände  $z = 0$  setzen:

$$V_{\infty}^{\text{vdW}}(z) = -\frac{C_3(\infty)}{z^3}, \quad C_3(\infty) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{\infty} \alpha_{\text{d}}(i\omega) d\omega. \quad (\text{B.9})$$

Für große Abstände  $z$  schreiben wir das Integral (B.6) in

$$V_{\epsilon}(z) = -\frac{1}{4\pi\alpha_{\text{fs}}z^4} \int_0^{\infty} \alpha_{\text{d}}\left(i\frac{x}{\alpha_{\text{fs}}z}\right) (1+x+2x^2) \exp(-2x) dx \quad (\text{B.10})$$

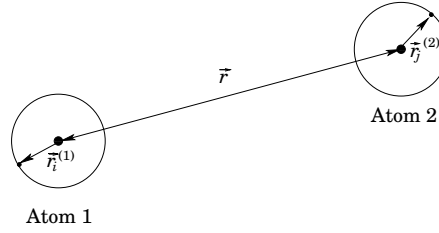
um und setzen das Argument von  $\alpha_{\text{d}}$  Null. Aus der Integration über  $x$  folgt:

$$V_{\infty}^{\text{ret}}(z) = -\frac{C_4(\infty)}{z^4}, \quad C_4(\infty) = \frac{3}{8\pi} \frac{\alpha_{\text{d}}(0)}{\alpha_{\text{fs}}}. \quad (\text{B.11})$$

## B.2 Atom-Kugel-Wechselwirkung

Zur Herleitung eines Potentials zwischen einer leitenden Kugel mit dem Radius  $R_{\text{K}}$  und einem Atom betrachten wir zunächst die Wechselwirkung zwischen zwei Atomen im Abstand  $r$  (vgl. Abbildung B.2). Diese wird klassisch durch das anziehende van der Waals-Potential proportional zu  $-1/r^6$  beschrieben und ihr Ursprung liegt in einer fluktuierenden Dipolkraft. Dieses Potential lässt sich mit Hilfe von zwei Atomen, die sich im Abstand  $r$  voneinander befinden, herleiten. Das zeitlich gemittelte Dipolmoment  $\langle \mathbf{d} \rangle$  ist für Atome mit einer kugelsymmetrischen Ladungsverteilung Null, aber es existiert ein momentanes Dipolmoment  $\mathbf{d}$ . Durch das Dipolmoment  $\mathbf{d}_1$  von Atom 1, wird ein elektrisches Feld  $\vec{E}_1 \propto \mathbf{d}_1/r^3$  im Abstand  $r$  erzeugt, das ein Dipolmoment  $\mathbf{d}_2$  am Atom 2 induziert und abhängig von der Polarisierbarkeit  $\alpha_2$  des Atoms ist:

$$\mathbf{d}_2 = \alpha_2 \vec{E}_1. \quad (\text{B.12})$$



**Abbildung B.3:** Veranschaulichung der Koordinaten zur quantenmechanischen Herleitung der Dipol-Dipol-Wechselwirkung zwischen zwei Atomen.

Dieses Dipolmoment erzeugt wiederum ein elektrisches Feld  $\vec{E}_2 \propto \mathbf{d}_2/r^3$  am Atom 1, so dass dort ein Dipolmoment  $\mathbf{d}_1 = \alpha_1 \vec{E}_2$  induziert wird. Insgesamt ist die potentielle Wechselwirkungsenergie zwischen den beiden induzierten Dipolen

$$E(r) = -\mathbf{d}_2 \cdot \vec{E}_1 = -\mathbf{d}_1 \cdot \vec{E}_2 \quad (\text{B.13})$$

und wir können das van der Waals-Potential schreiben als [118]:

$$V(r) = -\frac{C_6(\alpha_1, \alpha_2)}{r^6}. \quad (\text{B.14})$$

Der Stärkeparameter  $C_6$  hängt von den Polarisierbarkeiten  $\alpha_1$  und  $\alpha_2$  der Atome ab.

Die quantenmechanische Behandlung dieses Problems benötigt für das nicht-retardierte Potential eine Störungsrechnung zweiter Ordnung [20]. Hierfür betrachten wir zunächst – wie im klassischen Fall – zwei Atome im Abstand  $|\vec{r}| = r$  und einer Kernladung  $Z \cdot e$ , die sich an der Stelle  $\vec{0}$  (Atom 1) bzw.  $\vec{r}$  (Atom 2) befinden. Die Elektronen des ersten Atoms haben die Koordinaten  $\vec{r}_i^{(1)}$  und die des zweiten Atoms  $\vec{r}_j^{(2)}$ ,  $i, j = 1, \dots, Z$  (vgl. Abbildung B.3). Der Hamilton-Operator  $H$  des zwei-Atomsystems lautet

$$\hat{H}(\vec{r}, \vec{r}_i^{(1)}, \vec{r}_j^{(2)}) = \hat{H}_1(\vec{r}, \vec{r}_i^{(1)}) + \hat{H}_2(\vec{r}, \vec{r}_j^{(2)}) + V(\vec{r}, \vec{r}_i^{(1)}, \vec{r}_j^{(2)}), \quad (\text{B.15})$$

mit den Hamilton-Operatoren  $\hat{H}_1$  und  $\hat{H}_2$  des ersten bzw. zweiten Atoms und der Coulomb-Wechselwirkung  $V$  aller anderen Paare von geladenen Teilchen. Nach der Störungstheorie zweiter Ordnung ist die Wechselwirkungsenergie zwischen zwei Atomen durch

$$\Delta E = \langle 0|V|0\rangle + \sum_n \frac{|\langle 0|V|n\rangle|^2}{E_0 - E_n} \quad (\text{B.16})$$

gegeben, wobei  $|0\rangle$  der Grundzustand des ungestörten Zwei-Atomsystems ist und  $|n\rangle$  die angeregten Zustände beschreibt. Für eine kugelsymmetrische Ladungsverteilung (unter der Annahme, dass die Ladungsverteilungen keinen Überlapp besitzen) verschwindet aus Symmetriegründen der erste Term in (B.16) und der führende nicht-verschwindende Term lautet ( $\mathbf{e}$  ist der Einheitsvektor in Richtung  $\vec{r}$ )

$$-\frac{e^2}{r^3} \sum_{i,j} \left[ 3(\vec{r}_i^{(1)} \cdot \mathbf{e})(\vec{r}_j^{(2)} - \vec{r}) \cdot \mathbf{e} - \vec{r}_i^{(1)} \cdot (\vec{r}_j^{(2)} - \vec{r}) \right]. \quad (\text{B.17})$$



Diesen Beitrag können wir durch die Dipolmomente  $\mathbf{d}_1$  und  $\mathbf{d}_2$  der beiden Atome beschreiben und durch ein Dipolpotential nach (B.1) ausdrücken:

$$\tilde{V}(r) = -\frac{3(\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_1)(\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_2) - \mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{d}_2}{r^3}, \quad (\text{B.18})$$

welches eingesetzt in (B.16) das van der Waals-Potential (B.14) ergibt.

Für zwei Atome hängt der Stärkeparameter  $C_6$  von der jeweiligen Polarisierbarkeit  $\alpha_{1,2}(i\omega)$  der Atome ab und wurde in [66] berechnet:

$$C_6(\alpha) = \frac{3}{\pi} \int_0^\infty \alpha_1(i\omega)\alpha_2(i\omega)d\omega. \quad (\text{B.19})$$

Handelt es sich bei dem zweiten Atom um eine Kugel mit dem Radius  $R_K$  und einer frequenzunabhängigen Polarisierbarkeit  $R_K^3$ , folgt mit Gleichung (B.9):

$$C_6(\alpha) = \frac{3R_K^3}{\pi} \int_0^\infty \alpha(i\omega)d\omega = 12R_K^3 C_3. \quad (\text{B.20})$$

Das retardierte Potential zwischen einem Atom und einer Kugel lässt sich mit Hilfe der Quantenelektrodynamik herleiten. Buhmann *et al.* [21] erhalten für große Abstände  $r$  ein Potential abhängig von der Polarisierbarkeit  $\alpha(\omega)$  des Atoms und der Leitfähigkeit  $\epsilon(\omega)$  der Kugel mit der folgenden Gestalt (vgl. Gleichung (63) in [21]):

$$V(r) \simeq -\frac{\hbar c}{4\pi^2\epsilon_0} \frac{R_K^3}{r^7} \int_0^\infty \alpha(icz/r) \frac{\epsilon(icz/r) - 1}{\epsilon(icz/r) + 2} (2(1+z^2) + (1+z+z^2)) \exp(-2z) dz. \quad (\text{B.21})$$

Der Beitrag in diesem Integral entsteht für große  $r$  hauptsächlich bei kleinen Frequenzen  $\omega$ , so dass die materialabhängigen Größen  $\alpha$  und  $\epsilon$  durch  $\alpha(0) = \alpha(\omega = 0)$  und  $\epsilon(0) = \epsilon(\omega = 0)$  ersetzt werden können und sich das Integral in (B.21) berechnen lässt:

$$V(r) = -\frac{23\hbar c R_K^3 \alpha(0)}{16\pi^2 \epsilon_0} \left( \frac{\epsilon(0) - 1}{\epsilon(0) + 2} \right) \frac{1}{r^7}. \quad (\text{B.22})$$

Für ein Metall mit einer unendlichen Leitfähigkeit  $\epsilon(0) \rightarrow \infty$  ergibt dieser Ausdruck (in atomaren Einheiten):

$$V(r) = -\frac{23c R_K^3 \alpha(0)}{4\pi} \frac{1}{r^7} = -\frac{23R_K^3 \alpha(0)}{4\pi\alpha_{\text{fs}}} \frac{1}{r^7}. \quad (\text{B.23})$$

Ein Vergleich mit (B.11) zeigt den Zusammenhang zwischen  $C_7$  und  $C_4$ :

$$C_7 = \frac{46}{3} R_K^3 C_4. \quad (\text{B.24})$$



# Literaturverzeichnis

- [1] Einstein, A. (1924) *Sitz. Ber. Preuss. Akad. Wiss. (Berlin)* **22**, 261.
- [2] Bose, S. N. (1924) *Z. Phys.* **26**, 178.
- [3] Anderson, M., Ensher, J., Matthews, M., Wieman, C., und Cornell, E. (1995) *Science* **269**, 198.
- [4] Davis, K. B., Mewes, M.-O., Andrews, M. R., van Druten, N. J., Durfee, D., Kurn, D. M., und Ketterle, W. (1995) *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969.
- [5] Dalfovo, F., Giorgini, S., Pitaevskii, L., und Stringari, S. (1999) *Reviews of Modern Physics* **71**, 3.
- [6] Gerbier, F., Widera, A., Fölling, S., Mandel, O., Gericke, T., und Bloch, I. (2005) *Phys. Rev. Lett.* **95**, 050404.
- [7] Bloch, I. (2008) *Nature* **453**, 1016.
- [8] Meschede, D. (2007) *Nature Physics* **3**, 738.
- [9] Henkel, C., Schmiedmayer, J., und Westbrook, C. (2005) *Europ. Phys. J. D* **35**, 1.
- [10] Carraro, C. und Cole, M. W. (1998) *Prog. Surf. Sci.* **57**, 61.
- [11] Shimizu, F. (2001) *Phys. Rev. Lett.* **86**, 987.
- [12] Shimizu, F. und Fujita, J. (2002) *Phys. Rev. Lett.* **88**, 123201.
- [13] Friedrich, H., Jacoby, G., und Meister, C. G. (2002) *Phys. Rev. A* **65**, 032902.
- [14] Mody, A., Haggerty, M., Doyle, J. M., und Heller, E. J. (2001) *Phys. Rev. B* **64**, 085418.
- [15] Jurisch, A. und Friedrich, H. (2006) *Phys. Lett. A* **349**, 230.
- [16] Madroñero, J. und Friedrich, H. (2007) *Phys. Rev. A* **75**, 022902.
- [17] Zhao, B. S., Schulz, S. A., Meek, S. A., Meijer, G., und Schöllkopf, W. (2008) *Phys. Rev. A* **78**, 010902(R).
- [18] Vidali, G., Ihm, G., Kim, H.-Y., und Cole, M. W. (1991) *Surf. Sci. Rep.* **12**, 133.
- [19] Casimir, H. B. G. und Polder, D. (1948) *Phys. Rev.* **73**, 360.
- [20] Ashcroft, N. W. und Mermin, N. D. (1976) *Solid State Physics*, Holt, Rinehart and Winston, New York.
- [21] Buhmann, S. Y., Dung, H. T., und Welsch, D.-G. (2004) *J. Opt. B* **6**, 127.

- [22] Friedrich, H. und Trost, J. (2004) *Phys. Rep.* **397**, 359.
- [23] Arnecke, F., Friedrich, H., und Madroñero, J. (2006) *Phys. Rev. A* **74**, 062702.
- [24] Frank, W. M., Land, D. J., und Spector, R. M. (1971) *Rev. of Mod. Phys.* **43**, 1.
- [25] Blatt, J. M. und Jackson, J. D. (1949) *Phys. Rev.* **76**, 18.
- [26] Bethe, H. A. (1949) *Phys. Rev.* **76**, 38.
- [27] del Giudice, E. und Galzenati, E. (1965) *Nuovo Cimento* **38**, 443.
- [28] del Giudice, E. und Galzenati, E. (1965) *Nuovo Cimento* **40**, 739.
- [29] Arnecke, F., Friedrich, H., und Madroñero, J. (2007) *Phys. Rev. A* **75**, 042903.
- [30] Arnecke, F., Madroñero, J., und Friedrich, H. (2008) *Phys. Rev. A* **77**, 022711.
- [31] Verhaar, B. J., van den Eijnde, J. P. H. W., Voermans, M. A., und Schaffrath, M. M. J. (1984) *J. Phys. A* **17**, 595.
- [32] Arnecke, F., Friedrich, H., und Raab, P. (2008) *Phys. Rev. A* **78**, 052711.
- [33] Schrödinger, E. (1926) *Ann. Physik* **79**, 361.
- [34] Wentzel, G. (1926) *Z. Physik* **38**, 518.
- [35] Kramers, H. A. (1926) *Z. Physik* **39**, 828.
- [36] Brillouin, L. (1926) *C. R. Hebd. Acad. Sci.* **183**, 24.
- [37] Jeffreys, H. (1924) *Proc. London Math. Soc.* **23**, 428.
- [38] Joachain, C. J. (1975) *Quantum Collision Theory*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, Oxford.
- [39] Côté, R., Friedrich, H., und Trost, J. (1997) *Phys. Rev. A* **56**, 1781.
- [40] Segev, B., Côté, R., und Raizen, M. (1997) *Phys. Rev. A* **56**, R3350.
- [41] Landau, L. D. und Lifshitz, E. M. (1960) *Quantum Mechanics*, Pergamon, London.
- [42] Côté, R., Segev, B., und Raizen, M. (1998) *Phys. Rev. A* **58**, 3999.
- [43] Nolting, W. (2002) *Grundkurs Theoretische Physik 5/1*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg.
- [44] Yan, Z.-C. und Babb, J. F. (1998) *Phys. Rev. A* **58**, 1247.
- [45] Druzhinina, V. und DeKieviet, M. (2003) *Phys. Rev. Lett.* **91**, 193202.
- [46] Pasquini, T. A., Shin, Y., Sanner, C., Saba, M., Schirotzek, A., Pritchard, D. E., und Ketterle, W. (2004) *Phys. Rev. Lett.* **93**, 223201.
- [47] Oberst, H., Kouznetsov, D., Shimizu, K., Fujita, J. I., und Shimizu, F. (2005) *Phys. Rev. Lett.* **94**, 013203.
- [48] Oberst, H., Tashiro, Y., Shimizu, K., und Shimizu, F. (2005) *Phys. Rev. A* **71**, 052901.

- [49] Pasquini, T. A., Saba, M., Jo, G. B., Shin, Y., Ketterle, W., Pritchard, D. E., Savas, T. A., und Mulders, N. (2006) *Phys. Rev. Lett.* **97**, 093201.
- [50] Halliwell, X. W., Friedrich, H., Gibson, S. T., und Baldwin, K. G. H. (2003) *Opt. Comm.* **224**, 89.
- [51] Kouznetsov, D. und Oberst, H. (2005) *Phys. Rev. A* **72**, 013617.
- [52] Voronin, A. Y., Froelich, P., und Zygelman, B. (2005) *Phys. Rev. A* **72**, 062903.
- [53] Kallusch, S., Segev, B., und Côté, R. (2005) *Eur. Phys. J. D* **35**, 3.
- [54] Kouznetsov, D., Oberst, H., Neumann, A., Kuznetsova, Y., Shimizu, K., Bisson, J.-F., Ueda, K., und Brueck, S. R. J. (2006) *J. Phys. B* **39**, 1605.
- [55] Ketterle, W. und van Druten, N. J. (1996) *Phys. Rev. A* **54**, 656.
- [56] Visanescu, G., Schneeweiß, P., Gierling, M., Schefzyk, H., Günther, A., Sinuco, G., Judd, T., Weiß, C., Walser, R., und Fortagh, J. (2008) *Verhandl. DPG VI*, 43.
- [57] Jurisch, A. und Rost, J.-M. (2008) *Phys. Rev. A* **77**, 043603.
- [58] Druzhinina, V., Mudrich, M., Arnecke, F., und Madroñero, J. in Vorbereitung.
- [59] Barton, G. (1974) *J. Phys. B* **7**, 2134.
- [60] Haroche, S. (1990) Les Houches LIII, Course 13, North-Holland, Amsterdam.
- [61] Holstein, B. (2001) *Am. J. Phys.* **69**, 441.
- [62] Lifshitz, E. M. und Pitaevskii, L. P. (1980) *Statistical Physics: Part 2*, Pergamon Press, Oxford.
- [63] Lifshitz, E. M. (1956) *Sov. Phys. JETP* **2**, 73.
- [64] Oberst, H. und Shimizu, F. (2005) *J. of Phys: Conference Series* **19**, 158.
- [65] Marinescu, M., Dalgarno, A., und Babb, J. F. (1997) *Phys. Rev. A* **55**, 1530.
- [66] Kharchenko, P., Babb, J. F., und Dalgarno, A. (1997) *Phys. Rev. A* **55**, 3566.
- [67] Derevianko, A., Johnson, W. R., und Fritzsche, S. (1998) *Phys. Rev. A* **57**, 2629.
- [68] Johnson, W. R., Dzuba, V. A., Safronova, U. I., und Safronova, M. S. (2004) *Phys. Rev. A* **69**, 022508.
- [69] Rutherford, E. (1911) *Phil. Mag.* **6** **21**, 669.
- [70] Taylor, J. R. (1972) *Scattering Theory*, John Wiley & Sons, New York.
- [71] Fano, U. und Rau, A. R. P. (1986) *Atomic Collisions and Spectra*, Academic Press, Inc., Orlando.
- [72] Friedrich, H. (2006) *Theoretical Atomic Physics*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg.
- [73] Friedrich, H. und Jurisch, A. (2004) *Phys. Rev. Lett.* **92**, 103202.
- [74] Mesfin, E. und Friedrich, H. (2006) *Phys. Rev. A* **74**, 032103.

- [75] Abramowitz, M. und (eds.), I. A. S. (1970) Handbook of Mathematical Functions, Dover Publications, New York.
- [76] Flambaum, V. V., Gribakin, G. F., und Harabati, C. (1999) *Phys. Rev. A* **59**, 1998.
- [77] Moritz, M. J. Tunneln und Reflexion langer Wellen, Dissertation Technische Universität München (2001).
- [78] Jost, R. (1947) *Helv. Phys. Acta* **20**, 256.
- [79] Bagchi, B. und Seyler, R. G. (1979) *Am. J. Phys.* **47**, 11.
- [80] Talukdar, B., Laha, U., und Das, U. (1991) *Phys. Rev. A* **43**, 1183.
- [81] Sofianos, S. A., Rakityansky, S. A., und Massen, S. E. (1999) *Phys. Rev. A* **60**, 337.
- [82] O'Malley, T. F., Spruch, L., und Rosenberg, L. (1961) *J. Math. Phys.* **2**, 491.
- [83] Gao, B. (1998) *Phys. Rev. A* **58**, 4222.
- [84] Gao, B. (2000) *Phys. Rev. A* **62**, 050702.
- [85] Delves, L. M. (1958) *Nuclear Physics* **8**, 358.
- [86] Delves, L. M. (1960) *Phys. Rev.* **118**, 1318.
- [87] Bertocchi, L., Fubini, S., und Furlan, G. (1965) *Nuovo Cimento* **35**, 633.
- [88] Greene, C. H., Rau, A. R. P., und Fano, U. (1982) *Phys. Rev. A* **26**, 2441.
- [89] Rau, A. R. P. (1988) *Phys. Rev. A* **38**, 2255.
- [90] Newton, R. G. (1966) Scattering Theory of Waves and Particles, MacGraw-Hill, Inc, New York.
- [91] Willner, K. und Gianturco, F. A. (2006) *Phys. Rev. A* **74**, 052715.
- [92] Moritz, M. J., Eltschka, C., und Friedrich, H. (2001) *Phys. Rev. A* **63**, 042102.
- [93] Burke, P. G. (1977) Potential scattering in Atomic Physics, Plenum Press, New York, London.
- [94] Derevianko, A., Babb, J. F., und Dalgarno, A. (2001) *Phys. Rev. A* **63**, 052704.
- [95] Feinberg, G. und Sucher, J. (1968) *J. Chem. Phys.* **48**, 3333.
- [96] Baldwin, K. G. H. (2005) *Contemp. Phys.* **46**, 105.
- [97] Kagan, Y., Shlyapnikov, G. V., Vartan'yants, I. A., und Glukhov, N. A. (1982) *JETP Lett.* **35**, 477.
- [98] Papoular, M. (1983) *J. Phys. B* **18**, L821.
- [99] Denschlag, J., Umshaus, G., und Schmiedmayer, J. (1998) *Phys. Rev. Lett.* **81**, 737.
- [100] Bawin, M. und Coon, S. A. (2001) *Phys. Rev. A* **63**, 034701.
- [101] Cirone, M. A., Rzazewski, K., Schleich, W. P., Straub, F., und Wheeler, J. A. (2002) *Phys. Rev. A* **65**, 022101.

- [102] Kowalski, K., Podlaski, K., und Rembielinski, J. (2002) *Phys. Rev. A* **66**, 032118.
- [103] Lapidus, I. R. (1982) *Am. J. Phys* **50**, 45.
- [104] Adhikari, A. K. (1986) *Am. J. Phys* **54**, 362.
- [105] Gu, Z.-Y. und Quian, S. W. (1989) *Phys. Lett. A* **136**, 6.
- [106] Adhikari, S. K. und Gibson, W. G. (1992) *Phys. Rev. A* **46**, 3967.
- [107] Meixner, J. und Schäfke, F. W. (1954) *Mathieusche Funktionen und Sphäroidfunktionen*, Springer-Verlag, Berlin.
- [108] Antezza, M., Pitaevskii, L. P., und Stringari, S. (2005) *Phys. Rev. Lett.* **95**, 113202.
- [109] Bezerra, V. B., Klimchitskaya, G. L., Mostepanenko, V. M., und Romero, C. (2008) *Phys. Rev. A* **78**, 042901.
- [110] Barash, Y. S. und Kyasov, A. (1989) *Sov. Phys. JETP* **68**, 39.
- [111] Hernandez, J. H. und Assis, A. K. T. (2005) *Journal of Electrostatics* **63**, 1115.
- [112] Timmann, S. (1998) *Repetitorium der gewöhnlichen Differentialgleichungen*, Binomi, Hannover.
- [113] Kleber, M. (1994) *Phys. Rep.* **236**, 334.
- [114] Byrd, J. W. (1976) *Am. J. Phys.* **44**, 596.
- [115] Jackson, J. D. (1975) *Classical Electrodynamics*, John Wiley & Sons, New York.
- [116] Tikochinsky, Y. und Spruch, L. (1993) *Phys. Rev. A* **48**, 4223.
- [117] Yan, Z.-C., Dalgarno, A., und Babb, J. F. (1997) *Phys. Rev. A* **55**, 2882.
- [118] Demtröder, W. (2005) *Experimentalsphysik 3*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York.





# Danksagung

Mein besonderer Dank gilt Prof. Dr. **Harald Friedrich**, der mir immer helfend zur Seite stand und mir die nötige Unterstützung gegeben, aber auch die nötigen Freiheiten gelassen hat, die zur Vollendung dieser Arbeit geführt haben. Er war immer bereit, auch einfache Fragestellungen mehr als einmal zu erklären und mir Lösungsansätze für die verschiedenen Probleme zu zeigen und zu erläutern.

Weiter möchte ich Dr. **Javier Madroño** danken, der mir in vielen Diskussionen in den unterschiedlichsten Bereichen geholfen und mit nützlichen Verbesserungsvorschlägen und Kritiken diese Arbeit sehr beeinflusst hat.

Ebenso danke ich Dipl. Phys. **Johannes Eiglsperger** und Dipl. Phys. **Patrick Raab**, sowohl für die etlichen Hinweise und Hilfen in den letzten Jahren, als auch für die Korrekturarbeit und das Lesen dieser Arbeit.

Abschließend danke ich **Agnes Braun**, die mich immer unterstützt hat.