

Institut für Physik
der
Technischen Universität München
Theoretische Physik

Quantenreflexion von Atomen an attraktiven Potenzialschwänzen

Georg K. H. Jacoby

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

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr. Dr. h.c. D. Menzel

Prüfer der Dissertation: 1. Univ.-Prof. Dr. H. Friedrich
2. Univ.-Prof. Dr. A. Groß

Die Dissertation wurde am 13. Juni 2002 bei der Technischen Universität München
eingereicht und durch die Fakultät für Physik am 10. Juli 2002 angenommen.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Die WKB-Näherung	3
1.2	Numerische Berechnung von Reflektivitäten	7
1.3	Näherungsmethode für das Schwellenverhalten der Quantenreflexion .	10
1.4	Näherungsmethoden für das Hochenergieverhalten der Quantenreflexion	12
1.5	Casimir van der Waals Potenzial	14
2	Quantenreflexion an homogenen Potenzialen	18
2.1	Schwellenverhalten der Quantenreflexion	18
2.2	Hochenergieverhalten der Quantenreflexion	19
2.3	Vergleich analytische Näherung mit numerischer Rechnung	21
3	Quantenreflexion an inhomogenen Potenzialen	25
3.1	Quantenreflexion am Casimir van der Waals Potenzial	25
3.1.1	Skalierung der Schrödingergleichung	25
3.1.2	Modellpotenziale für das Casimir van der Waals Potenzial . .	27
3.1.3	Badlandsfunktion	28
3.1.4	Schwellenverhalten der Quantenreflexion für das Casimir van der Waals Potenzial	34
3.1.5	Quantenreflexion bei hohen Energien	37
3.1.6	Gesamtverhalten der Reflektivität	39
3.1.7	Vergleich der analytischen mit numerischen Lösungen	40
3.1.8	Bestimmung der Potenzialparameter	43
3.1.9	Vergleich mit experimentellem Ergebnis	46
3.2	Quantenreflexion an weiteren inhomogenen Potenzialen	48
4	Versuch einer Messung des Potenzialverlaufes durch Messung der Reflektivität	57
5	Zusammenfassung	60
A	Berechnung des Längenparameters b_{v_1} für das Modellpotenzial v_1	62

B	Berechnung der Reflektivität eines homogenen Potentials gemäß	
	$R \sim -i \exp\left(\frac{2i}{\hbar} \int^{r_t} p(r) dr\right)$	66
C	Berechnung des Längenparameters b_{sum} für das Summenpotential	
	$V_{sum}(r) = -C_4/r^4 - C_5/r^5$	68
	Danksagung	77

Abbildungsverzeichnis

1.1	Quantenreflexion im Badlandsbereich an einem attraktiven Potenzi- schwanz	10
2.1	Reflektivitäten $ R_\alpha $ homogener Potenzi- schwänze für Potenzen α von 3 bis 6	23
2.2	Darstellung der Reflektivitäten als $\log(-\log R_\alpha)$ für homogene Po- tenzi- schwänze	24
3.1	Formfunktionen für Casimir van der Waals Potenziale	28
3.2	Skalierte Badlandsfunktionen für verschiedene Energien	31
3.3	Skalierte Badlandsfunktionen für verschiedene Potenzialformen	32
3.4	Verlauf des Ortes des skalierten Maximums der skalierten Badlands- funktion	33
3.5	Skalierte Badlandsfunktion als Funktion des Logarithmus der skalierten Wellenzahl	34
3.6	Relative Abweichungen der homogenen Näherungen (1.53) vom Poten- zial v_1 im Badlandsbereich	35
3.7	Längenparameter für das schwelennahe Reflektivitätsverhalten des Casimir van der Waals Potenzi- schwanzes	38
3.8	Reflektivitäten $ R_{CvdW} $ von Casimir van der Waals Potenzialen für $\rho = 1/10$	41
3.9	Reflektivitäten $ R_{CvdW} $ von Casimir van der Waals Potenzialen für $\rho = 1$	42
3.10	Reflektivitäten $ R_{CvdW} $ von Casimir van der Waals Potenzialen für $\rho = 10$	43
3.11	Reflektivitäten $ R_{CvdW} $ des Casimir van der Waals Potenzi- als für ver- schiedene Werte von ρ	45
3.12	Gemessene Reflektivitäten für die Reflexion von angeregten Neon- Atomen an einer Siliziumoberfläche	49
3.13	Reflektivitäten $ R_{sum} $ des Summenpotenzi- als $V_{sum}(r) = -C_3/r^3 - C_4/r^4$	51
3.14	Steigungen der in Abbildung 3.13 gezeigten Reflektivitätsverläufe	52
3.15	Potenzialverläufe des Casimir van der Waals Potenzi- als v_1 und des Summenpotenzi- als $V_{sum} = -1/x^3 - 1/x^4$	53

3.16	Längenparameter b für das schwelennahe Reflektivitätsverhalten verschiedener Summenpotenziale und des Casimir van der Waals Potentials v_1	55
4.1	Relativer Fehler bei Bestimmung des Potenzialverlaufs aus gemessenen Reflektivitäten	59

Tabellenverzeichnis

1.1	Potenzialparameter für das kurz- und das langreichweitige Verhalten der Casimir van der Waals Potenziale	17
1.2	Potenzialparameter C_3 aus [Kharchenko, 1997], [Yan, 1997] und [Derevianko, 1999]	17
2.1	Koeffizienten b'_α für das Schwellenverhalten der Reflektivität von homogenen Potenzialschwänzen	19
2.2	Koeffizienten B_α für das Hochenergieverhalten der Reflektivität von homogenen Potenzialschwänzen	20
3.1	Parameter für eine Formfunktion der Casimir van der Waals Potenziale zwischen Alkalimetall-Atomen und einer leitenden Oberfläche	28

Kapitel 1

Einleitung

Ein sich durch einen klassisch erlaubten Bereich bewegendes Teilchen kann von einem Potenzial reflektiert werden, ohne einen klassischen Wendepunkt zu erreichen. Eine solche "Quantenreflexion" wird beispielsweise vom langreichweitigen Anteil einer Atom-Oberfläche-Wechselwirkung hervorgerufen. Ihre Auswirkung kann beträchtlich sein, da sie die Wahrscheinlichkeit für das Teilchen herabsetzt, nahe genug an die Oberfläche heranzukommen und dort mit den kurzreichweitigen Kräften wechselzuwirken. Untersuchungen zu inelastischen Streuungen, Oberflächenadsorptionen ("sticking") und dgl. sollten daher eine Quantenreflexion ins Kalkül ziehen. Sie darf insbesondere für geringe Energien des Teilchens bei Potenzialschwänzen nicht außer acht gelassen werden, die asymptotisch stärker als $1/r^2$ verschwinden. Für Teilchen mit gegen Null gehender Energie steigt die Wahrscheinlichkeit für das Teilchen, an diesem Potenzialschwanz reflektiert zu werden, nämlich gegen eins. Gerade bei Untersuchungen mit ultrakalten Teilchen sind Quantenreflexionen nahezu allgegenwärtig.

Versuche zur Messung der Quantenreflexion haben in den letzten Jahren steigendes Interesse gefunden, angespornt auch vom mittlerweile gesammelten experimentellen Know-How im Umgang mit ultrakalten Atomquellen. Als Beispiel muss hier nur auf die zur Zeit intensive Erforschung der Bose-Einstein-Kondensation verwiesen werden. Quantenreflexion tritt nämlich besonders deutlich erst bei tiefen Temperaturen in Erscheinung. Begonnen wurde mit der Untersuchung der Quantenreflexion von Helium- und Wasserstoffatomen an der Oberfläche von superflüssigem Helium [Nayak, 1983], [Berkhout, 1989], [Doyle, 1991] und [Yu, 1993]. Shimizu erweiterte diese Untersuchungen, indem er in den Nanokelvin-Bereich abgekühlte Atome an festen Oberflächen reflektierte [Shimizu, 2001]. Seine Meßergebnisse sollen den Retardierungseffekt bei van der Waals Potenzialen bestätigen. In einer jüngeren Veröffentlichung [Shimizu, 2002] nutzt Shimizu Eigenschaften der Quantenreflexion zur Herstellung eines reflexionsselektiven Bauelementes. Dabei äzt er eine Information in ein holografisches Oberflächengitter und modelliert so die Ladungsdichte an der Oberfläche des reflektierenden Bauteils. Da die Quantenreflexion kritisch von der Ladungsdichte abhängt, bildet die Intensität der reflektierten Atomstrahlen die

Information ab.

Das van der Waals Potenzial beschreibt die elektrostatische Wechselwirkung zweier polarisierbarer Atome bzw. die eines polarisierbaren Atoms mit einer leitenden oder dielektrischen Oberfläche. Die Atom-Oberfläche-Wechselwirkung ist bei kurzen Abständen proportional zu $-1/r^3$ [Vidali, 1991]. Bei größeren Abständen ist der durch die endliche Ausbreitungsgeschwindigkeit des elektromagnetischen Feldes hervorgerufene Retardierungseffekt nicht mehr vernachlässigbar. Wie von Casimir und Polder in [Casimir, 1948] diskutiert, wird das Potenzial bei diesen Abständen proportional zu $-1/r^4$. Dieses retardierte Potenzial ist im übrigen eine Manifestation der durch Nullpunktsschwankungen des quantisierten elektromagnetischen Feldes induzierten Kräfte, der sogenannte Casimir Effekt. Einen aktuellen und detaillierten Überblick zum theoretischen Unterbau und zum Stand der Technik der experimentellen Untersuchungen des Casimir Effektes liefern Bordag *et al.* in einer kürzlich erschienenen Veröffentlichung [Bordag, 2001]. Einige Veröffentlichungen untersuchen das retardierte van der Waals Potenzial (Casimir van der Waals Potenzial) auch zusammen mit einem kurzreichweitigen abstoßenden Potenzialanteil [Côté, 1997b], [Marani, 2000]. Der abstoßende Anteil wird durch das Prinzip des Atomspiegels erzeugt, bei dem ein Laserstrahl innerhalb eines Prismas totalreflektiert wird. Das dabei außerhalb des Prismas entstehende räumlich stark gedämpfte elektrische Feld bildet zusammen mit dem attraktiven Potenzialanteil eine Potenzialbarriere. Die Energieabhängigkeit der Reflexionswahrscheinlichkeit ist bei solchen gemischten Potenzialen nahezu eine Sprungfunktion, wie sie auch klassisch vorgesagt wird. Quanteneffekte flachen den Sprung lediglich etwas ab.

Quantenreflexion ist in den Bereichen zu erwarten, in denen WKB-Wellenfunktionen nicht als Näherungslösungen für die Schrödingergleichung herangezogen werden dürfen. In den Bereichen, in denen sie als Näherungslösungen anwendbar sind, wird nicht reflektiert. WKB-Wellenfunktionen sind nämlich flußerhaltend und unidirektionale Näherungslösungen der Schrödingergleichung. Folglich sollten vor allem die Bereiche näher untersucht werden, in denen ihre Gültigkeit versagt. Der Abschnitt 1.1 stellt daher kurz die WKB-Wellenfunktionen als Näherungslösungen der Schrödingergleichung und die Bedingungen für ihre Anwendbarkeit vor. Da alle in dieser Arbeit entwickelten analytischen Näherungen der Reflexionswahrscheinlichkeit mit Hilfe numerischer Verfahren verifiziert werden, erläutert der Abschnitt 1.2 das zugehörige mathematische Berechnungsverfahren, das dem angewandten Computeralgorithmus zugrundeliegt. Die Abschnitte 1.3 und 1.4 besprechen einige aus der Literatur bekannte Näherungsmethoden zum Abschätzen der Reflexionswahrscheinlichkeit im Schwellenbereich und für hohe Energien. Einen kurzen Überblick über Casimir van der Waals Potenziale und ihren Ursprung gibt Abschnitt 1.5. Mit den vorgestellten Näherungsmethoden werden nach Kenntnis des Autors erstmals im Abschnitt 2.2 das hochenergetische Reflektivitätsverhalten von homogenen Potenzialschwänzen und im Abschnitt 3.1 das nieder- und das hochenergetische Verhalten von Casimir van der Waals Potenzialschwänzen analytisch berechnet (siehe auch [Friedrich, 2002]). Diese Berechnung berücksichtigt auch die Abhängigkeit von der zugrundeliegenden

Form des attraktiven Gesamtpotenzials. Hierzu wird das Gesamtpotenzial mit drei unterschiedlichen Formfunktionen modelliert (siehe Abschnitt 3.1.2). Die Abschnitte 2.3 und 3.1.7 vergleichen die erhaltenen analytischen mit numerischen Ergebnissen. Genauere Untersuchungen der Badlandsfunktion im Abschnitt 3.1.3 zeigen deren Bedeutung bei der Abschätzung des ungefähren Reflektivitätsverhalten. Die Abschnitte 3.1.6 und 3.1.8 führen die Ergebnisse der vorhergehenden Abschnitte zum Casimir van der Waals Potentials zusammen und geben Methoden an, aus Meßdaten zur Reflektivität möglichst schnell und einfach Abschätzungen über Potenzialparameter zu erhalten. Die Vorzüge der hier entwickelten Verfahren insbesondere auch zum Nachweis des Retardierungseffektes illustriert Abschnitt 3.1.9 anhand der in [Shimizu, 2001] angegebenen Meßergebnisse. Der Abschnitt 3.2 verallgemeinert die gewonnenen Erkenntnisse auf weitere inhomogene Potenziale, die Summe zweier oder mehrerer homogener Potenzialanteile oder der Kehrwert solcher Summen sind. Wie der Potenzialverlauf möglicherweise direkt durch Messung der Reflexionswahrscheinlichkeit eines reflektierten Teilchens mittels Variation von dessen Energie abgetastet werden kann, beschreibt schließlich das Kapitel 4.

In der gesamten Arbeit wird immer nur der attraktive Potentialschwanz des Gesamtpotenzials betrachtet, an dem eine Reflexion klassisch gesehen verboten ist. Etwas kurzreichweitige, abstoßende Potenzialanteile werden vernachlässigt. Gerechtfertigt ist das mit der Beobachtung, dass eine Quantenreflexion bei realistischen Messungen weit außerhalb dieser abstoßenden Anteile auftritt. Außerdem konzentrieren sich die Untersuchungen in dieser Arbeit lediglich auf die Reflexionswahrscheinlichkeit, die Phaseninformation der Reflexionsamplitude bleibt unbeachtet.

1.1 Die WKB-Näherung

Die eindeutige Bestimmung der Reflektivität $|R|$ eines Potenzialabschnitts setzt voraus, dass in dem Potenzialabschnitt wenigstens ein abgegrenzter Bereich definiert werden kann, innerhalb dem alle Reflexion stattfindet. Dies ist äquivalent zur Forderung, dass beidseits ausserhalb dieses Bereiches die Lösungen der Schrödingergleichung unidirektionale Wellenfunktionen sind. Für eine von rechts einfallende Welle kann also rechts neben dem abgegrenzten Bereich die Wellenfunktion als

$$\psi(r) \approx \exp(-ikr) + R \exp(ikr) \quad (1.1)$$

und links davon als

$$\psi(r) \approx T \exp(-ikr) \quad (1.2)$$

darstellbar sein. Die Regionen, in denen diese Formeln gelten, können auch erst asymptotisch erreicht werden. d.h. für $r \rightarrow 0$ bzw. für $r \rightarrow \infty$.

Die WKB-Wellenfunktionen¹ sind flusserhaltend und stellen solche unidirektionalen Lösungen dar. Damit lässt sich der abgegrenzte Bereich mit Hilfe von Bedin-

¹Benannt nach WENTZEL, KRAMERS und BRILLOUIN, die 1926 Arbeiten zu dieser Thematik publizierten.

gungen für die Anwendbarkeit der WKB-Wellenfunktionen als Näherungslösungen der Schrödingergleichungen abschätzen. Wo die WKB-Funktionen gute Näherungen sind, dürften Reflexionen zu vernachlässigen sein. Wo die WKB-Näherungen versagen, könnten jedenfalls Reflexionen auftreten. Über die Frage, wo genau und in welchem Maße Reflexionen im letzteren Bereich stattfinden, kann jedoch keine genaue Aussage getroffen werden. Der Bereich, in dem WKB-Näherungen schlecht sind, stellt aber zumindest eine obere Schranke für den Reflexionsbereich dar (selbstverständlich kann der Reflexionsbereich auch kleiner sein). Es lohnt sich also, die Bedingungen für die Anwendbarkeit der WKB-Näherung näher zu untersuchen. In der Literatur trifft man immer wieder zwei unterschiedliche Bedingungen an. Ihre Ableitungen und Vorhersagestärken sind nachfolgend kurz erläutert. Hierfür werden die WKB-Näherungen nach einer bestimmten Methode entwickelt, wie sie beispielsweise in [Landau, 1979] beschrieben ist. Es sind zahlreiche weitere Ableitungen publiziert, nur ausschnittsweise wird auf [Friedrich, 1998] und [Berry, 1972] verwiesen.

Die zeitunabhängige Schrödingergleichung für die eindimensionale Bewegung eines Teilchens mit der Energie E und Masse² M im Potenzial $V(r)$,

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2\psi(r)}{dr^2} + V(r)\psi(r) = E\psi(r), \quad (1.3)$$

läßt sich mit dem klassischen Impuls des Teilchens am Ort r ,

$$p(r) = \sqrt{2M(E - V(r))}, \quad (1.4)$$

auch in folgender Form ausdrücken:

$$\frac{d^2\psi(r)}{dr^2} + \frac{p(r)^2}{\hbar^2}\psi(r) = 0. \quad (1.5)$$

Ein Ansatz zum Herleiten der WKB-Wellenfunktion besteht darin, die Lösungen von (1.5) als Funktion von

$$\psi(r) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}g(r)\right] \quad (1.6)$$

zu schreiben. Einsetzen dieser Funktion in die Schrödingergleichung (1.5) liefert:

$$\left(\frac{dg(r)}{dr}\right)^2 - i\hbar\frac{dg^2(r)}{dr^2} = p^2(r). \quad (1.7)$$

Die WKB-Funktionen sollen nach Voraussetzung quasi-klassische Eigenschaften haben. Deshalb wird $g(r)$ in eine Potenzreihe in \hbar entwickelt und anschließend werden nur niedrige Ordnungen von \hbar berücksichtigt:

$$g(r) = g_0(r) + \frac{\hbar}{i}g_1(r) + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 g_2(r) + \dots \quad (1.8)$$

²In der gesamten Arbeit bezeichnet M die reduzierte Masse.

Einsetzen dieser Entwicklung in (1.7) und Ordnen der Terme nach gleichen Potenzen von \hbar liefert für die nullte Ordnung von \hbar :

$$\left(\frac{dg_0(r)}{dr}\right)^2 = p^2(r), \quad (1.9)$$

d.h.

$$g_0(r) = \pm \int^r p(r') dr'. \quad (1.10)$$

Ein Vergleich von (1.9) mit Gleichung (1.7) legt nahe, dass die Näherung (1.10) solange gut ist, solange der zweite Term klein gegenüber dem ersten Term auf der linken Seite des Gleichheitszeichen ist, d.h. $\hbar |g''(r)/g'(r)^2| \ll 1$. Diese Bedingung für die Anwendbarkeit von WKB-Funktionen als Lösungen der Schrödingergleichung (1.5) lautet mit dem klassischen Impuls $p(r)$ wegen $g'(r) \approx g'_0(r) = p(r)$ auch:

$$B_1(r) = \hbar \left| \frac{p'(r)}{p^2(r)} \right| = \left| \frac{d}{dr} \left(\frac{\hbar}{p(r)} \right) \right| \ll 1. \quad (1.11)$$

Die Bedingung $B_1(r) \ll 1$ bietet in vielen Fällen einen ersten Anhaltspunkt für die Anwendbarkeit der WKB-Lösungen, im allgemeinen ist sie jedoch weder hinreichend noch notwendig. Dass sie allgemein nicht notwendig ist, kann leicht am Beispiel des $1/r^4$ -Potenzials verdeutlicht werden. Bei der Energie Null sind die WKB-Funktionen erster Ordnung für alle r exakte Lösungen der Schrödingergleichung. Die linke Seite der Gleichung (1.11) ist allerdings proportional zu r und wächst für $r \rightarrow \infty$ selbst gegen Unendlich. Dass sie allgemein auch nicht hinreichend ist, sieht man am Beispiel eines Teilchens mit mittlerer kinetischer Energie in einem Potenzial mit schnellen und schwachen Oszillationen, wie einem Potenzial mit der lokalen de Broglie Wellenlänge $\hbar/p(r) = 1 + \sin(qr)/q^{3/2}$. In einem solchen Potenzial ist WKB nirgendwo eine gute Näherung. Jedoch ist die linke Seite von (1.11) hier $|\cos(qr)|/\sqrt{q}$ und wird für $q \rightarrow \infty$ beliebig klein.

Grundsätzlich erwartet man nach (1.11) quantenmechanische Reflexionen in Potenzialbereichen, in denen das lokale Potenzial $V(r)$ auf einer Längenskala der lokalen de Broglie Wellenlänge $\hbar/p(r)$ stark variiert. Umgekehrt sollten sich in Potenzialbereichen mit räumlich langsam variierendem Potenzial keine nennenswerten quantenmechanischen Effekte bemerkbar machen. In diesen Bereichen dominiert das klassische Verhalten des Teilchens.

Die Berücksichtigung der ersten Ordnung von \hbar der in (1.7) eingesetzten Entwicklung (1.8) ergibt $g'_0(r)g'_1(r) + g''_0(r)/2 = 0$. Daraus folgt mit $g'_0(r) = p(r)$:

$$g'_1(r) = -\frac{p'(r)}{2p(r)}, \quad (1.12)$$

bzw.

$$g_1(r) = -\frac{1}{2} \ln p(r). \quad (1.13)$$

Die Gültigkeit der Entwicklung bis zur Ordnung \hbar kann diesmal abgeschätzt werden, indem verlangt wird, dass die nächste Ordnung \hbar^2 bereits klein gegenüber der Ordnung \hbar ist. Hierzu sei am Rande bemerkt, dass bei dieser asymptotischen Entwicklung das Mitnehmen höherer Ordnungen auch zu einer Verschlechterung der Näherung führen kann. Die Glieder der Ordnung \hbar^2 ergeben

$$g_0'(r) g_2'(r) + \frac{1}{2} (g_1'(r))^2 + \frac{1}{2} g_1''(r) = 0, \quad (1.14)$$

bzw. mit $g_0'(r) = p(r)$ und Gleichung (1.13)

$$g_2'(r) = \frac{p''(r)}{4p^2(r)} - \frac{3p'(r)^2}{8p^3(r)}. \quad (1.15)$$

Einsetzen der Entwicklung (1.8) mit den Gliedern (1.10) und (1.13) bis zur Ordnung \hbar in (1.6) gibt die WKB-Wellenfunktion erster Ordnung,

$$\psi(r) = \frac{C_1}{\sqrt{p(r)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int^r p(r') dr'\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p(r)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int^r p(r') dr'\right). \quad (1.16)$$

Sie läßt sich allgemein als Superposition einer einlaufenden und einer auslaufenden Welle mit einem Phasenfaktor schreiben [Friedrich, 1998]

$$\psi(r) \propto \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{r_t}^r p(r') dr'\right) + e^{-i\phi} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{r_t}^r p(r') dr'\right). \quad (1.17)$$

Bei Reflexion oberhalb eines Potentialschwanzes existiert in der Regel kein klassischer Umkehrpunkt und somit auch kein "natürlicher" Bezugspunkt als Startpunkt r_t für die Integration in der WKB-Funktion. Dadurch ist die Phase nicht eindeutig definiert, sondern von einem willkürlich gewählten Referenzpunkt abhängig. Sind die WKB-Funktionen für r bis ins Unendliche gute Näherungen und geht das Potenzial asymptotisch gegen eine konstante Funktion, so wird i.a. die Phase nicht durch Angabe eines Bezugspunktes, sondern durch Vergleich mit der freien Welle $\cos(kr)$ bzw. $\exp(ikr)$ festgelegt. Diese ist ihrerseits von der Wahl des Koordinaten-Nullpunktes abhängig, der jedoch bei eindimensionalen Problemen mit am Ursprung singulären Potenzialen eindeutig definiert ist. Grundsätzlich bewirkt jede Verschiebung des Koordinatenbezugspunktes eine Multiplikation der beiden Terme mit einem Phasenfaktor.

Im klassisch erlaubten Bereich $V(r) < E$ lautet die reelle WKB-Funktion auch

$$\psi(r) = \frac{C_1}{\sqrt{p(r)}} \cos\left(\pm \left| \frac{1}{\hbar} \int_{r_t}^r p(r') dr' \right| - \frac{\phi}{2}\right). \quad (1.18)$$

Im klassisch verbotenen Bereich $V(r) > E$ lautet sie entsprechend

$$\psi(r) = \frac{C_1}{\sqrt{p(r)}} \exp\left(\pm \left| \frac{1}{\hbar} \int_{r_t}^r p(r') dr' \right|\right). \quad (1.19)$$

Durch zweifaches Ableiten der WKB-Wellenfunktion sieht man [Friedrich, 1998], [Maitra, 1996], dass sie folgende Gleichung erfüllt:

$$\psi''(r) + \frac{p^2(r)}{\hbar^2} \psi(r) + \left(\frac{p''(r)}{2p(r)} - \frac{3p'(r)^2}{4p^2(r)} \right) \psi(r) = 0. \quad (1.20)$$

Sie entspricht der zeitunabhängigen Schrödingergleichung mit einem Zusatzpotenzial

$$V_{\text{zusatz}}(r) = -\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{p''(r)}{2p(r)} - \frac{3p'(r)^2}{4p^2(r)} \right). \quad (1.21)$$

Eine daraus ableitbare Bedingung für die Anwendbarkeit der WKB-Lösungen ist also, dass $|V_{\text{zusatz}}(r)| \ll p^2(r)/\hbar^2$, d.h.

$$B(r) = \hbar^2 \left| \frac{p''(r)}{2p^3(r)} - \frac{3p'(r)^2}{4p^4(r)} \right| \ll 1 \quad (1.22)$$

Diese Bedingung $B(r) \ll 1$ entspricht im übrigen der weiter oben abgeleiteten Bedingung, dass der Term (1.15) der Ordnung \hbar^2 klein gegenüber dem Term (1.12) der Ordnung \hbar ist.

Der Bereich, in dem (1.22) oder (1.11) nicht erfüllt ist, wird in der Literatur auch häufig "Badlands" genannt [Côté, 1997a]. Demgegenüber nennt man den Bereich, in dem (1.22) gilt, den WKB-Bereich. Die über (1.22) definierte Funktion wird nachfolgend einfach als Badlandsfunktion $B(r)$ bezeichnet, die Funktion gemäß (1.11) als reduzierte Badlandsfunktion $B_1(r)$. $B(r)$ unterscheidet sich von $B_1(r)$ im wesentlichen durch den Zusatzterm $p''/2p^3$. Für die Badlandsfunktion $B(r)$ gilt beispielsweise $B(r) = 0$ für konstante Potenziale bei beliebiger Energie und auch für das bereits genannte Potenzial $V(r) = -C_4/r^4$ bei der Energie Null, bei der WKB ja für alle r eine gute Näherung ist. Für das oben diskutierte Potenzial mit der de Broglie Wellenlänge $\hbar/p(r) = 1 + \sin(qr)/q^{3/2}$ führt der Zusatzterm $p''/2p^3$ zu einem Beitrag proportional zu $\sqrt{q} \sin(qr)$, der für $q \rightarrow \infty$ auch gegen Unendlich wächst. Aus diesen beiden Beispielen wird bereits ersichtlich, dass die Badlandsfunktion $B(r)$ bei einer größeren Klasse von Potenzialen eine vorhersagekräftigere Bedingung für die Anwendbarkeit von WKB zu sein scheint.

1.2 Numerische Berechnung von Reflektivitäten

Dieser Abschnitt erläutert eine spezielle Berechnungsmethode für die numerische Bestimmung der Reflektivität eines attraktiven Potenzialschwanzes, wie sie in [Côté, 1997a] und [Côté, 1997b] beschrieben ist. Voraussetzung für den Potenzialschwanz ist einerseits, dass er für $r \rightarrow \infty$ gegen Null geht. Asymptotisch ist die Welle dann in dem äußeren WKB-Bereich eine freie ein- und auslaufende Welle

$$\psi_{\text{frei}}(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} C_{+,-} \exp(\pm ikr) \quad (1.23)$$

mit der asymptotischen Energie $k = \sqrt{2ME}/\hbar$. Andererseits wird verlangt, dass es zusätzlich einen inneren WKB-Bereich gibt, der vom äußeren durch die Badlands getrennt ist. Für attraktive Potenzschwänze, deren asymptotisches Verhalten für $r \rightarrow 0$ in führender Ordnung durch einen homogenen $-1/r^\alpha$ -Potentialterm mit einer Potenz $\alpha > 2$ genähert werden kann, gibt es beispielsweise nahe dem Ursprung einen solchen inneren WKB-Bereich. Dies macht man sich leicht mit Hilfe der reduzierten Badlandsfunktion (1.11) klar, mit der abgeschätzt wird, dass für homogene Potentiale

$$V_\alpha(r) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{(\beta_\alpha)^{\alpha-2}}{r^\alpha} \quad (1.24)$$

bei der Energie Null

$$\left(\frac{r}{\beta_\alpha}\right)^{\alpha/2-1} \ll \frac{2}{\alpha} \quad (1.25)$$

gelten muss. Diese Bedingung ist für genügend kleine r erfüllt, solange $\alpha > 2$. Für endliche Energien $\hbar^2 k^2/(2M)$ hat die Badlandsfunktion (1.11) ein Maximum bei $(\beta_\alpha/r)^\alpha = 2(\alpha+1)(k\beta_\alpha)^2/(\alpha-2)$ und sinkt monoton mit fallenden (und auch steigenden) Werten von r/β_α .

Eine von Unendlich (äußerer WKB-Bereich) in Richtung Ursprung einlaufende freie Welle bewegt sich also durch die Badlands, in denen sie eine Quantenreflexion erfährt, und endet im inneren WKB-Bereich als eine in Richtung Ursprung laufende unidirektionale WKB-Welle. Im Prinzip läßt sich die Reflexionswahrscheinlichkeit über das Verhältnis der beiden in Richtung Ursprung laufenden Wellen, der freien Welle im äußeren WKB-Bereich und der WKB-Welle im inneren WKB-Bereich, bestimmen³. Aufgrund des Reziprozitätsprinzips⁴ ist diese Reflexionswahrscheinlichkeit gleich der des umgekehrten Falles, bei dem eine vom inneren in den äußeren WKB-Bereich laufende Welle betrachtet wird. Für diesen Fall läßt sich im inneren WKB-Bereich die nach Unendlich und die reflektierte zurück zum Ursprung laufende WKB-Welle wie folgt ansetzen:

$$\psi_{WKB}(r) = \frac{1}{\sqrt{p(E,r)}} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_r^{r_m} p(E,r') dr'\right) + R_{WKB} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_r^{r_m} p(E,r') dr'\right) \right], \quad (1.26)$$

wobei r_m ein beliebiger Anpassungspunkt innerhalb des inneren WKB-Bereichs ist. Dementsprechend ist r ein noch näher am Ursprung gelegener Ort. In den Badlands muss die Schrödingergleichung numerisch mit der Anfangsbedingung gelöst werden,

³Die obere Grenze des inneren WKB-Bereichs liegt für realistische Werte der Potenzialstärken der hier näher zu betrachtenden Casimir van der Waals Potentiale bei einigen zehn bis hundert Bohr'schen Radien. Bei solchen Abständen sollten oberflächennahe Effekte, wie Reflexion an abstoßenden Potenzialanteilen, Adsorptionen, etc. vernachlässigbar sein. Die Amplitude der von außen in den inneren WKB-Bereich einlaufenden Welle wird damit rein durch eine Quantenreflexion am attraktiven Potentialschwanz geschwächt.

⁴Die Gültigkeit dieser Beziehung für ein Stufenpotential ist beispielsweise in [Côté, 1997b] gezeigt.

dass ihre Lösung $\psi(r)$ für $r \rightarrow \infty$ (für ein ausreichend großes r , bei dem das Potenzial bereits vernachlässigt werden kann) eine freie Welle der Form (1.23) ist. Die Konstante C_+ für die auslaufende freie Welle kann auf den Wert eins gesetzt werden, da sie bei der Anpassung der logarithmischen Ableitung von numerisch gelöster Wellenfunktion und WKB-Funktion am Anpassungspunkt r_m herausfällt. Ein Vergleich der WKB-Funktion (1.26) mit einer Überlagerung von aus- und einlaufender Welle $\exp(ik'r) + R \exp(-ik'r)$ im inneren WKB-Bereich liefert folgende Beziehung zwischen der WKB-Reflexionsamplitude R_{WKB} und der Reflexionsamplitude R :

$$R_{WKB} = R \exp[i\eta(r_m)] \quad (1.27)$$

mit

$$\eta(r_m) = 2 \lim_{r \rightarrow 0} \left(\frac{1}{\hbar} \int_r^{r_m} p(r') dr' - k'r \right). \quad (1.28)$$

Die Reflexionsamplitude R unterscheidet sich damit von R_{WKB} um eine Phase η , die die Tatsache berücksichtigt, dass der Anpassungspunkt r_m nicht am Ursprung liegt und der lokale Impuls p sich bei endlichem r von seinem asymptotischen Wert $\hbar k'$ unterscheidet. Gleichsetzen der logarithmischen Ableitungen der WKB-Funktion (1.26) und der numerisch berechneten Lösung der Schrödingergleichung $\psi(r)$ am Anpassungspunkt ergibt

$$R_{WKB} = - \frac{\frac{\psi'(r_m)}{\psi(r_m)} - \frac{i}{\hbar} p(r_m) + \frac{p'(r_m)}{2p(r_m)}}{\frac{\psi'(r_m)}{\psi(r_m)} + \frac{i}{\hbar} p(r_m) + \frac{p'(r_m)}{2p(r_m)}}. \quad (1.29)$$

Da bei r_m im WKB-Bereich die reduzierte Badlandsfunktion (1.11) verschwinden sollte, ist jeweils der letzte Term im Zähler und Nenner von (1.29) klein gegenüber dem vorletzten Term $p(r_m)/\hbar$. Der Ausdruck (1.29) vereinfacht sich damit zu

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

Diesen vereinfachten Ausdruck erhält man auch, indem die numerisch gelöste Wellenfunktion an die Überlagerung einer auslaufenden und reflektierten Welle $\exp[ip(r_m)(r - r_m)/\hbar] + R_{WKB} \exp[-ip(r_m)(r - r_m)/\hbar]$ mit einer Wellenzahl angepasst wird, die dem lokalen klassischen Impuls bei r_m entspricht.

In der gesamten Arbeit wird lediglich der Betrag der Reflexionsamplitude betrachtet, also

$$|R| = |R_{WKB}|. \quad (1.31)$$

Diesen Betrag bezeichnen wir als Reflektivität; in der Literatur wird das Quadrat der Reflektivität als Reflexionswahrscheinlichkeit bezeichnet.

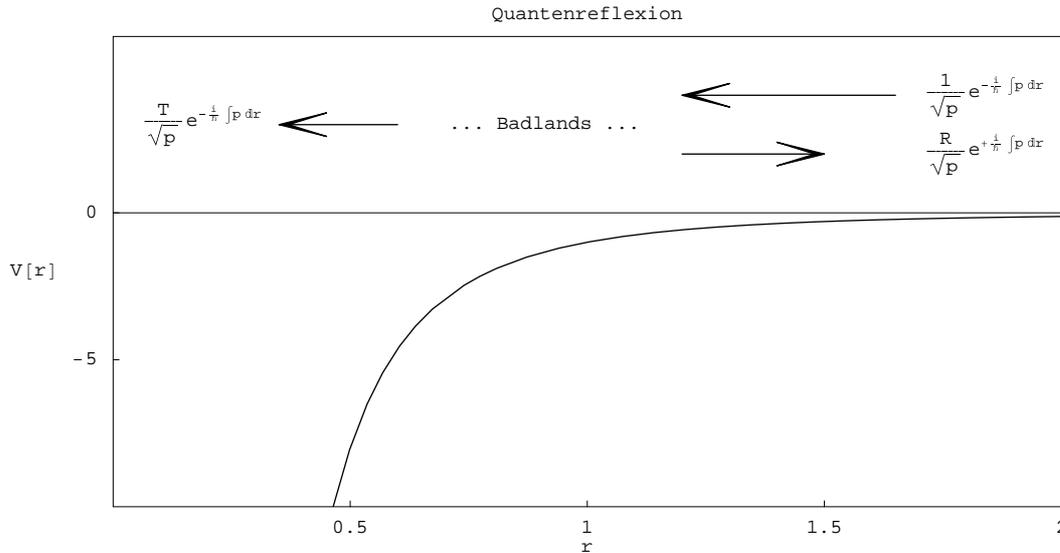


Abbildung 1.1: Schematisch dargestellte Reflexion und Transmission einer einlaufenden freien Welle im Badlandsbereich an einem attraktiven Potenzienschwanz.

1.3 Näherungsmethode für das Schwellenverhalten der Quantenreflexion

Wie in [Eltschka, 2000] dargelegt, läßt sich das Schwellenverhalten ($k \rightarrow 0$) der Reflexion aus den Wellenfunktionen für $k = 0$ ableiten. Unter der ersten Annahme, dass die Lösungen der schwelennahen (für nichtverschwindende Energien $E > 0$) Schrödingergleichung glatt von der Energie abhängen, unterscheiden sie sich von denen der Schrödingergleichung an der Schwelle (bei Energie Null) nur durch einen Summanden der Ordnung $O(E) = O(k^2)$. Betrachtet man lediglich Lösungen der schwelennahen Schrödingergleichung unterhalb dieser Ordnung, so sind die Lösungen bei Energie Null gleichzeitig auch Lösungen bei der Energie E . Wird zweitens angenommen, dass das Potenzial asymptotisch für $r \rightarrow \infty$ verschwindet⁵, dann sind die Lösungen der Schrödingergleichung bei Energie Null, d.h. $d^2\psi(r)_{E=0, r \rightarrow \infty} / dr^2 = 0$, dort proportional zu $c_1 r + c_0$ mit beliebigen Konstanten $c_{0,1}$. Für den gesamten Potenzialbereich müssen also zwei Linearkombinationen $\psi_{0,E=0}$ und $\psi_{1,E=0}$ aus den Lösungen der Schrödingergleichung bei Energie Null ermittelt werden, die sich asymptotisch wie $\psi_{0,E=0} \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} 1$ und $\psi_{1,E=0} \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} r$ verhalten. Als Ansatz für eine schwelennahe Lösung wird dann eine Linearkombination dieser beiden Lösungen $\psi_{0,E=0}$ und $\psi_{1,E=0}$ zur Energie Null bis zur Ordnung k^2 ,

$$\psi(r)_{E \rightarrow 0} \sim \psi_{0,E=0}(r) + ik\psi_{1,E=0}(r) + O(k^2), \quad (1.32)$$

⁵Allgemein kann von einem Schwellenverhalten nur dann gesprochen werden, wenn die Schwelle selbst als wohldefinierte Energie festgelegt werden kann. Dies ist insbesondere dann der Fall, wenn das Potenzial asymptotisch verschwindet.

gebildet. Wegen der asymptotischen Verhalten von $\psi_{0,E=0}$ und $\psi_{1,E=0}$ ist diese ebenfalls bis zur Ordnung k^2 asymptotisch nicht unterscheidbar von einer nach rechts laufenden Welle

$$\psi(r)_{E \rightarrow 0} \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} 1 + ikr = \exp(ikr) + O(k^2) \quad (1.33)$$

Drittens wird angenommen, dass bei Energie Null für $r < r_m$ ein innerer WKB-Bereich existiert. Dies ist beispielsweise bei homogenen Potenzialen der Fall, die asymptotisch für $r \rightarrow 0$ stärker als $-1/r^2$ abfallen (siehe auch Abschnitt 1.2). Die beiden Linearkombinationen für Energie Null, $\psi_{0,E=0}$ und $\psi_{1,E=0}$, im inneren WKB-Bereich lassen sich dann durch die WKB-Wellenfunktionen

$$\psi_{0,E=0}^{\text{WKB}} \stackrel{r < r_m}{\sim} \frac{D_0}{\sqrt{p_0(r)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_r^\infty p_0(r') dr' - \frac{\phi_0}{2} \right] \quad (1.34)$$

und

$$\psi_{1,E=0}^{\text{WKB}} \stackrel{r < r_m}{\sim} \frac{D_1}{\sqrt{p_0(r)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_r^\infty p_0(r') dr' - \frac{\phi_1}{2} \right] \quad (1.35)$$

nähern, wobei $p_0(r)$ der lokale klassische Impuls bei Energie Null ist. Die Aufgabe besteht nun darin, die Phasenkoeffizienten $\phi_{0,1}$ und die Normierungskonstanten $D_{0,1}$, die eine Aussage über die Reflektivität liefern, so zu wählen, dass im inneren WKB-Bereich $r < r_m$ die Linearkombination dieser WKB-Näherungen

$$\psi_{E \rightarrow 0}^{\text{WKB}}(r) \stackrel{r < r_m}{\sim} \psi_{0,E=0}^{\text{WKB}}(r) + ik\psi_{1,E=0}^{\text{WKB}}(r) + O(k^2) \quad (1.36)$$

mit der Linearkombination (1.32) übereinstimmt.

Die Reflektivität bestimmt sich dann gemäß [Eltschka, 2000] zu

$$|R| \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} 1 - 2bk, \quad (1.37)$$

wobei k die Wellenzahl ist, die die asymptotische Energie definiert, und b ein Längenparameter, der mit den ermittelten Phasenkoeffizienten $\phi_{0,1}$ und Normierungskonstanten $D_{0,1}$ gleich

$$b = \frac{D_1}{D_0} \sin \left(\frac{\phi_0 - \phi_1}{2} \right) \quad (1.38)$$

ist. Wie in [Eltschka, 2000] näher erläutert, wurde er bei der Umformung der Linearkombination (1.36) in

$$\psi_{E \rightarrow 0}^{\text{WKB}}(r) \stackrel{r < r_m}{\sim} \frac{1}{\sqrt{p_0(r)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_r^\infty p_0(r') dr' - \frac{\phi_0}{2} + ikb + O(k^2) \right] \quad (1.39)$$

eingeführt. Der Längenparameter ist ein "Schwanzparameter", der lediglich vom Potenzial außerhalb des inneren WKB-Bereichs abhängt. Im übrigen bestimmt er auch die Quantisierungsregel $n(E)$ nahe der Schwelle und die Zustandsdichte $\rho(E) = dn/dE$ knapp unterhalb der Schwelle [Eltschka, 2000].

Moritz hat mit Hilfe numerischer Rechnungen in [Moritz, 2001] gezeigt, dass eine Ersetzung der linearen Form (1.37) durch eine entsprechende Exponentialform

$$|R| \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \exp(-2bk) \quad (1.40)$$

das Verhalten der Reflektivität in zahlreichen Fällen, einschließlich homogener Potenzialschwänze, in nächster Ordnung wiedergibt. So liefert eine Entwicklung der Funktion (1.40) für kleine Energien, d.h. kleine k , ja gerade die Funktion (1.37).

1.4 Näherungsmethoden für das Hochenergieverhalten der Quantenreflexion

Im semiklassischen Limes, der für viele Potentiale bei hohen Energien erreicht wird, verschwinden die Reflexionsamplituden. Die Energieabhängigkeit der Reflexionsamplitude hängt dann von Details des Potentials ab. Es gibt keine universell gültige Formel, wie (1.37) und (1.40) für das Schwellenverhalten. Falls eine der Ableitungen des Potentials unstetig ist, dann bestimmt die niedrigste Ordnung n , bei der diese Unstetigkeit auftritt, die Reflektivität, die im semiklassischen Limes wie \hbar^n verschwindet. Wenn jedoch alle Ableitungen des Potentials stetig sind, dann fällt die Reflektivität im allgemeinen exponentiell ab.

Es sind zahlreiche Näherungsverfahren zum Berechnen der Reflektivität bekannt, von denen hier nur ein kleiner Ausschnitt kursorisch erwähnt wird. Praktisch und historisch bedeutend ist die Bremmer-Methode (siehe z.B. [Berry, 1972] und [Maitra, 1996]). Hier wird die WKB-Wellenfunktion mit ortsabhängigen Amplituden $b(r)/\sqrt{p(r)}$ in die Schrödingergleichung eingesetzt und die entstehende Differentialgleichung näherungsweise gelöst. Das Ergebnis ist

$$R_{\text{Bremmer}} = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dr \frac{p'(r)}{2p(r)} \exp \left[(2i/\hbar) \int_0^r p(r') dr' \right] \right|^2. \quad (1.41)$$

Bei einer weniger formalistischen Herleitung dieser Formel in [Berry, 1972] wird das Potenzial in lauter kleine Stufen unterteilt. Die Reflexion und Transmission der Wellenfunktion kann hierbei an jeder Stufe über das analytisch exakt lösbare Stufenpotenzial berechnet werden. Die Summe aller Reflexionen liefert die Reflexionswahrscheinlichkeit R_{Bremmer} .

Weitere Methoden bedienen sich der Badlandsfunktion $B(r)$. Wie im Abschnitt 1.1 ausgeführt, hängt diese Funktion mit dem Zusatzpotenzial (1.21) der modifizierten Schrödingergleichung (1.20) zusammen. Die WKB-Funktionen (1.16) sind dabei echte Lösungen dieser modifizierten Schrödingergleichung mit dem eigentlichen Potenzial und dem Zusatzpotenzial. Dieses Zusatzpotenzial bewirkt gerade, dass das eigentliche Potenzial reflexionsfrei wird. Es verändert also das eigentliche Potenzial gerade in den Bereichen, in denen es üblicherweise reflektiert, in ein reflexionsfreies Potenzial.

Analog der Born'schen Näherung betrachtet man das Produkt aus Zusatzpotenzial und Wellenfunktion als Inhomogenität der eigentlichen Schrödingergleichung. Die entsprechende Integralgleichung liefert die Lösungen der homogenen Gleichung. Als nullte Näherung werden nun die WKB-Wellen eingesetzt, was eine Approximation der Reflexionswahrscheinlichkeit bedeutet. Das Ergebnis von Maitra und Heller in [Maitra, 1996] ist

$$R_{\text{MH}} = \frac{m^2}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dr \frac{V(r) - V_{\text{eff}}(r, E)}{p(r)} \exp \left[(2i/\hbar) \int_0^r p(r') dr' \right] \right|^2, \quad (1.42)$$

mit

$$V_{\text{eff}}(r, E) = V(r) - \hbar^2 \left[\frac{5}{32M} \left(\frac{V'(r)}{E - V(r)} \right)^2 + \frac{V''(r)}{8M[E - V(r)]} \right]. \quad (1.43)$$

Die Hauptbeiträge zu den Integralen in (1.42) und (1.43) kommen gerade aus Bereichen im Ortsraum, in denen WKB eine schlechte Näherung ist. Insofern ist die Näherung, gerade hier WKB-Funktionen für das Produkt mit dem Zusatzpotenzial einzusetzen, meist sehr bedenklich. Insbesondere für kleine Energien versagen diese beiden Näherungen völlig.

Ebenfalls basierend auf der Badlandsfunktion analysieren Prokovskii *et al.* in [Prokovskii, 1958a] und [Prokovskii, 1958b] eine Näherung der Reflexionsamplitude und gelangen zu folgendem Ergebnis:

$$R_P = -i \exp \left(\frac{2i}{\hbar} \int^{r_t} p(r) dr \right), \quad (1.44)$$

wobei r_t der komplexe Umkehrpunkt mit dem kleinsten (positiven) Imaginärteil ist. Der Ausdruck (1.44) ist im Vergleich zu den obigen Ausdrücken (1.41) und (1.42) analytisch leichter zu handhaben. Wie nachfolgend am Beispiel des Exponentialpotenzials

$$V_{\text{exp}}(r) = -\frac{\hbar^2}{2M} (K_0)^2 \exp(-r/\beta_{\text{exp}}) \quad (1.45)$$

gezeigt wird, liefert (1.44) gute Resultate. Für diesen Potenzialtyp ist die Näherung sogar identisch mit dem exakten Ergebnis. Beim Exponentialpotenzial liegt der "innere" WKB-Bereich bei $r \rightarrow -\infty$. Die Schrödingergleichung kann mit dem Potenzial (1.45) bei allen Energien analytisch gelöst werden [Abramowitz, 1972]. Die exakte Reflektivität ist unter anderem in [Berry, 1972] und [Côté, 1997a] angegeben:

$$|R_{\text{exp}}| = \exp(-2\pi k\beta_{\text{exp}}) \quad (1.46)$$

Die komplexen Umkehrpunkte für das Exponentialpotenzial liegen bei:

$$\frac{r_{t,\text{exp}}^{(n)}}{\beta_{\text{exp}}} = -\ln \left(\frac{k^2}{(K_0)^2} \right) + (2n+1)i\pi, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (1.47)$$

Dabei entspricht $n = 1$ dem Umkehrpunkt mit dem kleinsten positiven Imaginärteil. Das Integral im Exponenten von (1.44) wird entlang des Weges $r = -\ln [k^2 / (K_0)^2] \beta_{\text{exp}} + \xi i \pi \beta_{\text{exp}}$ für $\xi = 0 \rightarrow 1$ berechnet. Dies ergibt das für alle Energien exakte Ergebnis (1.46).

1.5 Casimir van der Waals Potenzial

Im allgemeinen verhalten sich typische molekulare Potenziale für die elektrischen und magnetischen Wechselwirkungen zwischen zwei Teilchen bei großen Abständen r der Teilchen zueinander wie

$$V(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} - \sum_i \frac{C_{\alpha_i}}{r^{\alpha_i}}. \quad (1.48)$$

Die führende Ordnung von α hängt wesentlich vom Ladungszustand der beiden Teilchen ab. So erhält man $\alpha = 1$ für die Wechselwirkung zwischen zwei Punktladungen (Coulomb Gesetz), $\alpha = 2$ für eine Punktladung und einen permanenten elektrischen Dipol, $\alpha = 3$ für zwei permanente elektrische Dipole, $\alpha = 4$ für eine Punktladung und einen induzierten elektrischen Dipol sowie einen induzierten elektrischen und einen induzierten magnetischen Dipol (ohne Retardierung, siehe auch [Farina, 2002]), $\alpha = 6$ für die nicht retardierte van der Waals Anziehung im Nahbereich und $\alpha = 7$ für die retardierte van der Waals Anziehung im Fernbereich zwischen zwei induzierten elektrischen Dipolen. Man erhält $\alpha = 7$ auch für die Wechselwirkung zwischen einem induzierten elektrischen und einem induzierten magnetischen Dipol (mit Retardierung, siehe auch [Farina, 2002]).

Die van der Waals Anziehung veranschaulicht man sich am Bild zweier nicht-polarer Atome, die zwar keine permanenten elektrischen Dipolmomente haben, bei denen sich die Position ihrer Elektronen dennoch verändert (wobei das zeitliche Mittel der Elektronenverteilung von den Atomorbitalen bestimmt wird). Man kann sich daher vorstellen, dass sie momentane Dipole ausbilden, deren Betrag und Richtung sich ständig ändert. Die augenblickliche Elektronenanordnung des ersten Atoms mit einem zugehörigen Dipolmoment polarisiert das zweite Atom und induziert dort ein momentanes Dipolmoment. Die beiden Dipole richten sich dabei prinzipiell immer so zueinander aus, dass sie sich stets maximal anziehen. Maximale Anziehung liegt vor, wenn die beiden Richtungen des induzierenden und des induzierten Dipolmomentes gleich sind. Die Stärke der Anziehung hängt zudem von der Polarisierbarkeit des ersten Atoms ab. Sein augenblickliches Dipolmoment ist umso stärker, je geringer der Einfluß der Kernladung auf seine äußeren Elektronen ist. Die Polarisierbarkeit des zweiten Atoms geht wegen dessen Induzierung ebenfalls ein. Eine vernünftige Näherung für die Wechselwirkung liefert die London Formel:

$$V(r) = -\frac{3}{2} \frac{I_1 I_2}{I_1 + I_2} \frac{\alpha_1 \alpha_2}{r^6}, \quad (1.49)$$

wobei $I_{1,2}$ die Ionisierungsenergien und $\alpha_{1,2}$ die Polarisierbarkeiten der beiden Atome sind.

Retardierungseffekte werden deutlich, wenn man bei der Berechnung der Anziehung die Kopplung an das elektromagnetische Feld berücksichtigt. Wenn die Elektronendichte des einen Atoms fluktuiert, wird ein Photon erzeugt, das mit endlicher Lichtgeschwindigkeit c zum zweiten Atom fliegt. Es stimuliert eine Fluktuation bei Atom zwei, das wiederum ein Photon zurück an Atom eins sendet. Für den Rundlauf benötigen die beiden Photonen zusammen die Zeit $2r/c$. Fluktuationen der Elektronendichte treten hingegen ungefähr auf einer Zeitskala von $\Delta E/\hbar$ auf, wobei ΔE eine typische Anregungsenergie ist. Falls die Zeit des Rundlaufs länger als die Fluktuationszeit ist, hat sich das Dipolmoment des ersten Atoms bereits in eine neue Richtung bewegt. In dieser Richtung ist die Anziehung mit dem Dipolmoment des zweiten Atoms abgeschwächt. Detaillierte Rechnungen zeigen, dass die Wechselwirkung etwa für Abstände $2r/c \gg \Delta E/\hbar$ auf proportional zu $-1/r^7$ abgefallen ist.

Ähnliche Überlegungen gelten auch für die Wechselwirkung eines Atoms mit einer elektrisch leitenden oder dielektrischen Wand. Hier wird über die Wechselwirkung des Atoms mit allen Oberflächenatomen summiert. Die Summation führt zu einer Reduktion der Potenz des Potenzials (1.49) auf den Wert drei. Das einfachste Modell für die Wechselwirkung eines Atoms im Grundzustand und einer Wand mit der dielektrischen Konstante ε berücksichtigt die Wechselwirkung eines Dipols d mit seiner Spiegelladung und liefert das Lennard-Jones-Potenzial:

$$V_{LJ}^{(n)}(r) = -\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 1} \frac{\langle d_{\parallel}^2 \rangle + 2 \langle d_{\perp}^2 \rangle}{64\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r^3} = -\frac{C_3^{(n)}}{r^3}, \quad (1.50)$$

wobei $\langle d_{\parallel}^2 \rangle$ und $\langle d_{\perp}^2 \rangle$ die Erwartungswerte der quadrierten Dipole parallel und senkrecht zur Oberfläche der Wand sind [Lennard, 1932], $\varepsilon = n^2$ und n der Brechungsindex des Dielektrikums ist. Dieser Ausdruck ist näherungsweise richtig für konstantes ε und kleine r . Für die Wechselwirkung eines Atoms mit einer ideal leitenden Wand gilt:

$$V_{LJ}(r) = \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} V_{LJ}^{(n)} = \frac{\langle d_{\parallel}^2 \rangle + 2 \langle d_{\perp}^2 \rangle}{64\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r^3} = -\frac{C_3}{r^3}. \quad (1.51)$$

Mit Berücksichtigung des Retardierungseffektes beschreibt das Casimir van der Waals Potenzial die Wechselwirkung im Nah- und Fernbereich. Das Casimir van der Waals Potenzial zwischen einem kugelsymmetrischen Atom im Grundzustand und einer ideal leitenden Oberfläche kann bei Kenntnis der (komplexen) frequenzabhängigen Dipol-Polarisierbarkeit $\alpha_d(i\omega)$ des Atoms wie folgt dargestellt werden:

$$V_{CvdW}(r) = -\frac{1}{4\pi\alpha_{fs}r^4} \int_0^{\infty} \alpha_d\left(\frac{i\xi}{\alpha_{fs}r}\right) \exp^{-2\xi} (2\xi^2 + 2\xi + 1) d\xi, \quad (1.52)$$

wobei $\alpha_{fs} = e^2/(\hbar c)$ die Feinstrukturkonstante und α_d die bei der imaginären Frequenz $i\omega$ berechnete dynamische elektrische Dipolpolarisierbarkeit ist (siehe auch

[Dzyaloshinskii, 1961]). Das asymptotische Verhalten des Potentials lautet einerseits für kleine Entfernungen,

$$V_{CvdW}(r) \stackrel{r \rightarrow 0}{\sim} -\frac{C_3}{r^3} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\beta_3}{r^3}, \quad (1.53)$$

(van der Waals Bereich) und andererseits für große Entfernungen,

$$V_{CvdW}(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{C_4}{r^4} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{(\beta_4)^2}{r^4}, \quad (1.54)$$

(Casimir Bereich). Die Potenzialstärke für das kurzreichweitige Verhalten ist

$$C_3 = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \alpha_d(i\omega) d\omega, \quad (1.55)$$

und für das langreichweitige Verhalten

$$C_4 = \frac{3}{8\pi} \frac{\alpha_d(0)}{\alpha_{fs}} = 16.36\alpha_d(0). \quad (1.56)$$

Die Parameter β_3 und β_4 sind quantenmechanische Längenparameter, welche die mittlere Reichweite des Potentials angeben. Sie liegen typischerweise bei einigen Tausend Bohr'schen Radien. In (1.53) bedeutet $r \rightarrow 0$, dass r klein gegenüber den Längenparametern β_3 und β_4 ist. Für ganz kleine Abstände in der Größenordnung von einigen Bohr'schen Radien verkomplizieren weitere, hier vernachlässigte Einflüsse, wie Adsorption ("sticking"), etc. das kurzreichweitige Potenzialverhalten. Damit ist ein entscheidendes Kriterium für das Auftreten einer "reinen" quantenmechanischen Reflexion am Casimir van der Waals Potenzial der Abstand des Reflexionsbereiches von der Oberfläche, innerhalb dem alle quantenmechanische Reflexion stattfindet. Es wird plausibel gemacht, dass sich dieser Reflexionsbereich für sinkende Projektilenergie weiter von der Oberfläche entfernt und bereits bei Energien ultrakalter Projektile in der Größenordnung einiger Bohr'schen Radien liegt. Durch geeignete Energiewahl kann also der Reflexionsbereich so weit nach außen verschoben werden, dass oberflächennahe Effekte, wie Adsorption, vernachlässigbar werden. Brenig *et al.* untersuchen in [Brenig, 1992], [Böheim, 1984] und [Böheim, 1982] ebenfalls die Stelle des Übergangs von reiner quantenmechanischer Reflexion zu oberflächennahen Effekten und kommen zu einem ähnlichen Ergebnis.

Marinescu *et al.* tabellieren in [Marinescu, 1997] das numerisch berechnete exakte Casimir van der Waals Potenzial zwischen einem Wasserstoffatom und einer leitenden Oberfläche. Diese Autoren geben auch Näherungsergebnisse für Alkalimetall-Atome als Projektile an, basierend auf Eielektronenmodell-Potenzialen. Sie verwenden bei der Berechnung der Potenzialstärken semiempirische Ergebnisse für die dynamische Polarisierbarkeit und integrieren anschließend die Funktion (1.52). Die Tabelle 1.1 listet für diese Potenziale die anzuwendenden Potenzialparameter C_3 und C_4 für deren

	H	Li	Na	K	Rb	Cs
C_3	0.250	1.447	1.576	2.153	2.291	2.589
C_4	73.62	2683	2662	4789	5221	6579
β_3	919	3.661×10^4	1.321×10^5	3.069×10^5	7.139×10^5	1.255×10^6
β_4	520	8.239×10^3	1.494×10^4	2.613×10^4	4.033×10^4	5.646×10^4
l	294	1854	1690	2225	2278	2540
ρ	1.77	4.44	8.84	11.75	17.70	22.23
K_0	6.02×10^{-3}	2.40×10^{-3}	5.24×10^{-3}	5.28×10^{-3}	7.77×10^{-3}	8.75×10^{-3}

Tabelle 1.1: Potenzialparameter, die das kurz- und das langreichweitige Verhalten der Casimir van der Waals Potenziale angeben, die von Marinescu *et al.* in [Marinescu, 1997] für die Wechselwirkung eines Wasserstoffatoms oder verschiedener Alkalimetall-Atome mit einer ideal leitenden Oberfläche berechnet und tabelliert wurden. Die Berechnungen für die Alkalimetall-Projektile basieren auf einem Einelektronenmodell-Potenzial. Die ersten beiden Reihen zeigen die Stärkeparameter C_3 und C_4 in atomaren Einheiten. Die nächsten beiden Reihen zeigen die entsprechenden Längen β_3 und β_4 in Einheiten des Bohr'schen Radius. Die letzten drei Reihen geben an: die Länge l (siehe Gleichung (3.1)), die die Skala für den Übergang vom kurz- zum langreichweitigen Bereich definiert, den kritischen Parameter ρ (siehe Gleichung (3.7)), der die relative Wichtigkeit des $-1/r^3$ - und des $-1/r^4$ -Anteils des Potenzials bestimmt, und den Skalierungsparameter K_0 , die Stärke des Casimir van der Waals Potenzials bei l , Gleichung (3.2))

Li^1	Na^2	K^3	Rb^3	Cs^3
1.518	1.889	2.86	3.36	4.14

Tabelle 1.2: Ergebnisse von tiefergehenden Berechnungen des van der Waals Parameters C_3 der Alkali-Oberfläche-Wechselwirkung aus [Kharchenko, 1997]¹, [Yan, 1997]² und [Derevianko, 1999]³.

kurz- und langreichweitige Potenzialverhalten. Die Tabelle 1.1 gibt ferner die quantenmechanischen Längenparameter β_3 und β_4 an, die typischerweise ziemlich groß sind und in der Größenordnung von mehreren Tausend Bohr'schen Radien liegen. Kharchenko *et al.* geben in [Kharchenko, 1997], [Yan, 1997] und [Derevianko, 1999] ebenfalls Werte für die Potenzialstärke C_3 an, die auf tiefergehenden Berechnungen der Parameter der Alkalimetall-Oberfläche-Wechselwirkung beruhen. Eine Liste dieser neueren C_3 -Werte zeigt Tabelle 1.2.

Kapitel 2

Quantenreflexion an homogenen Potenzialen

2.1 Schwellenverhalten der Quantenreflexion

Eltschka *et al.* untersuchen in [Eltschka, 2000], [Eltschka, 2001], [Côté, 1997a] und [Trost, 1998b] das Schwellenverhalten der Reflektivität von attraktiven Potenzialen, so auch von homogenen Potenzialen der Form

$$V_\alpha(r) = -\frac{C_\alpha}{r^\alpha} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{(\beta_\alpha)^{\alpha-2}}{r^\alpha}. \quad (2.1)$$

Nach dem zweiten Gleichheitszeichen ist der Längenparameter β_α eingeführt, der über die Plank'sche Konstante \hbar mit der Potenzialstärke C_α verbunden ist. Er legt die Längenskala fest, auf der Quanteneffekte zu erwarten sind. Mit diesem Längenparameter kann die Schrödingergleichung (1.3) für homogene Potenziale auf eine einzige dimensionslose Variable $k\beta_\alpha$ skaliert werden. Alle Eigenschaften ihrer Lösungen hängen nur vom Parameter $k\beta_\alpha$ ab. Unter der Voraussetzung $\alpha > 2$ entspricht der Fall $k\beta_\alpha \rightarrow \infty$ (Hochenergielimes) dem semiklassischen Limes und der Fall $k\beta_\alpha \rightarrow 0$ (Schwellenverhalten) dem antiklassischen Limes (vgl. [Trost, 1998a], [Eltschka, 2001] und [Friedrich, 1998]).

Die Schrödingergleichung bei der Energie Null besitzt für diese Potenziale die Lösungen

$$\psi(r)_{1,E=0} = \sqrt{r} J_\nu \left(\frac{2}{\alpha-2} \left(\frac{\beta_\alpha}{r} \right)^{\alpha/2-1} \right) \quad (2.2)$$

und

$$\psi(r)_{2,E=0} = \sqrt{r} J_{-\nu} \left(\frac{2}{\alpha-2} \left(\frac{\beta_\alpha}{r} \right)^{\alpha/2-1} \right), \quad (2.3)$$

wobei J_ν und $J_{-\nu}$ Besselfunktionen der Ordnung $\nu = \frac{1}{\alpha-2}$ sind. Nach der im Abschnitt

α	3	4	5	6
b'_α	π	1	0.63	0.48

Tabelle 2.1: Die Koeffizienten b'_α , die nach Gleichung (2.4) gegeben sind und vor der dimensionslosen Größe $k\beta_\alpha$ im Exponenten von (2.6) auftreten, die das Schwellenverhalten der Reflektivität von homogenen Potenzialschwänzen beschreibt.

1.3 erläuterten Methode berechnet sich der Längenparameter zu

$$b_\alpha = \frac{\sin[\pi/(\alpha-2)]}{(\alpha-2)^{2/(\alpha-2)}} \frac{\Gamma(1-\frac{1}{\alpha-2})}{\Gamma(1+\frac{1}{\alpha-2})} \beta_\alpha = \frac{\pi(\alpha-2)^{(\alpha-4)/(\alpha-2)}}{(\Gamma(\frac{1}{\alpha-2}))^2} \stackrel{def}{=} b'_\alpha \beta_\alpha. \quad (2.4)$$

Für die ganzzahligen Potenzen $\alpha = 3, \dots, 6$ sind die Ergebnisse für b'_α in Tabelle 2.1 gelistet. Für große α vereinfacht sich der gemäß (2.4) definierte Längenparameter b'_α zu

$$b'_\alpha \stackrel{\alpha \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\pi}{\alpha}. \quad (2.5)$$

Mit der Näherung (1.40) ist die Reflektivität im Schwellenbereich damit

$$|R_\alpha| \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \exp(-2b'_\alpha k\beta_\alpha). \quad (2.6)$$

2.2 Hochenergieverhalten der Quantenreflexion

Gemäß den Ausführungen im Abschnitt 2.1 entspricht der Hochenergielimes beim homogenen Potenzial (2.1) dem semiklassischen Limes, in dem die Reflexionsamplituden verschwinden. Für hohe Energien werden die Werte der Badlandsfunktion (1.22) jedoch immer kleiner und stärker um den Ort lokalisiert, bei dem der Absolutwert der Potenzialenergie gleich der Gesamtenergie ist (siehe auch Abschnitt 3.1.3). Dieser wird in der Arbeit auch als komplexer Umkehrpunkt bezeichnet. Basierend auf der im Abschnitt 1.4 vorgestellten Näherungsmethode von Prokovskii in [Prokovskii, 1958a] und [Prokovskii, 1958b] läßt sich die Reflexionswahrscheinlichkeit nähern über

$$R \sim -i \exp\left(\frac{2i}{\hbar} \int^{r_t} p(r) dr\right). \quad (2.7)$$

Für das homogene Potenzial (2.1) mit ganzzahligem α liegen insgesamt α komplexe Umkehrpunkte bei $(-1)^{1/\alpha} r_0$, wobei r_0 der Punkt ist, bei dem der Absolutwert der Potenzialenergie, $|V_\alpha(r_0)|$, gleich der asymptotischen kinetischen Energie ist, d.h. der Gesamtenergie $E = \hbar^2 k^2 / (2M)$,

$$r_0 = k^{-2/\alpha} (\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}. \quad (2.8)$$

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

Tabelle 2.2: Die Koeffizienten B_α , die nach Gleichung (2.11) gegeben sind und vor der dimensionslosen Größe $(k\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}$ im Exponenten von (2.10) auftreten, die das Hochenergieverhalten der Reflektivität von homogenen Potenzialschwänzen beschreibt.

Der komplexe Umkehrpunkt mit dem kleinsten positiven Imaginärteil ist

$$r_{t,\alpha} = \left[\cos\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) + i \sin\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) \right] k^{-2/\alpha} (\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}. \quad (2.9)$$

Im Integral im Exponenten von Gleichung 1.44 liefert die Integration entlang eines Weges auf der reellen Achse nur reelle Beiträge und beeinflusst damit lediglich die Phase der Reflexionsamplitude. Die Integration senkrecht zur reellen Achse entlang des Weges $r = \text{Re}(r_{t,\alpha}) + i\xi \text{Im}(r_{t,\alpha})$ mit $\xi = 0 \rightarrow 1$ (siehe Anhang B) ergibt bei hohen Energien für den Absolutwert der Reflexionsamplitude

$$|R_\alpha| \sim \exp\left(-B_\alpha (k\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}\right). \quad (2.10)$$

Die vor dem k -abhängigen Term im Exponenten von (2.10) auftretenden Koeffizienten B_α sind

$$B_\alpha = 2 \sin\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) \text{Re} \left\{ \int_0^1 \sqrt{1 + \left[\cos\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) + i\xi \sin\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) \right]^{-\alpha}} d\xi \right\}. \quad (2.11)$$

Die numerischen Werte dieser Koeffizienten sind in der Tabelle 2.2 für $\alpha = 3, \dots, 8$ aufgelistet. Für große α wird der Realteil des Integrales in Gleichung (2.11) gleich eins und (2.11) vereinfacht sich zu

$$B_\alpha \stackrel{\alpha \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2\pi}{\alpha}. \quad (2.12)$$

Ein alternativer und sehr einfacher Ansatz zum Ableiten einer Näherung für das Hochenergieverhalten des Reflexionskoeffizienten bei homogenen attraktiven Potenzialschwänzen basiert auf einer Methode mit Vergleichspotenzialen. Als Vergleichspotenzial wird das bereits im Abschnitt 1.4 behandelte Exponentialpotenzial herangezogen. Bei der Energie $E = \hbar^2 k^2 / (2M)$ liegt der für die Quantenreflexion maßgebliche Bereich bei r_0 gemäß Gleichung (2.8). Das Exponentialpotenzial wird daher in diesem Bereich über geeignete Wahl seiner Parameter $-\hbar^2 K_0^2 / (2M)$ und β_{exp} so an das homogene Potenzial angepaßt, dass die Potenzialwerte und -steigungen beider Potenziale bei r_0 übereinstimmen. Bei r_0 hat das homogene Potenzial den Wert $V_\alpha(r_0)$ und seine erste Ableitung den Wert $(-\alpha/r_0) V_\alpha(r_0)$. Das Exponentialpotenzial (1.45) hat den Wert $V_{\text{exp}}(r_0)$ und seine Ableitung den Wert $(-1/\beta_{\text{exp}}) V_{\text{exp}}(r_0)$.

Für die erforderliche Übereinstimmung wird der Parameter β_{exp} zu

$$\beta_{\text{exp}} = \frac{r_0}{\alpha} \quad (2.13)$$

gewählt. Eine Näherung für den Reflexionskoeffizienten erhält man dann aus dem (exakten) Ausdruck (1.40) für die Reflektivität des Exponentialpotenzials mit diesem Wert β_{exp} ,

$$|R_\alpha| \approx \exp\left(\frac{-2\pi k r_0}{\alpha}\right) = \exp\left(-\frac{2\pi}{\alpha} (k\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}\right), \quad (2.14)$$

wobei wegen (2.8)

$$k r_0 = (k\beta_\alpha)^{1-2/\alpha} \quad (2.15)$$

gilt. Die Näherung (2.14) enthält die gleiche Potenz $1 - 2/\alpha$ für $k\beta_\alpha$ im Exponenten wie Gleichung (2.10). Der Koeffizient $2\pi/\alpha$ im Exponenten entspricht dem Grenzwert (2.12) des Koeffizienten B_α für große α .

Im Grenzfall hoher Potenzen $\alpha \rightarrow \infty$ stimmen die Gleichungen (2.10) und (2.14) auch mit dem Schwellenverhalten (1.40),

$$|R_\alpha| \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \exp(-2b'_\alpha k\beta_\alpha), \quad (2.16)$$

überein, wenn der Grenzwert (2.5) von b'_α für große α in Gleichung (2.6) eingesetzt wird. Für endliche Potenzen α sind die Näherungen (2.10) und (2.14) offensichtlich falsch nahe der Schwelle, da ihre Exponenten eine Potenz von $k\beta_\alpha$ aufweisen, die kleiner als eins ist.

2.3 Vergleich analytische Näherung mit numerischer Rechnung

Die Reflektivitäten der homogenen Potenziale sind mit der im Abschnitt 1.2 vorgestellten Methode über einen großen Energiebereich numerisch berechnet worden. Der Energiebereich wurde zumindest so gewählt, dass er das Schwellenverhalten und das Hochenergieverhalten der Reflektivität einschließt. Die Ergebnisse für homogene Potenzialschwänze mit den Potenzen $\alpha = 3, \dots, 6$ sind in Abbildung 2.1 dargestellt. Der Abschnitt (a) dieser Abbildung zeigt $\log |R_\alpha|$ als Funktion von $k\beta_\alpha$. Das Schwellenverhalten manifestiert sich in einem linearen Abfall von $\log |R_\alpha|$ für kleine Werte von $k\beta_\alpha$. Die Steigung ist $-2b'_\alpha$, wobei die b'_α über Gleichung (2.4) definiert sind. Dieser anfänglich lineare Abfall schwächt sich in Richtung höherer Energien ab. Dort erwarten wir auch wegen Gleichung (2.10), dass $-\log |R_\alpha|$ proportional zu $a_\alpha = (k\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}$ ist. Diese Erwartung wird auch durch die numerischen Rechnungen gestützt, wie Abschnitt (b) der Abbildung 2.1 zeigt. Hier ist $\log |R_\alpha|$ als Funktion von a_α geplottet. Die durchgehenden geraden Linien veranschaulichen das von Gleichung (2.10) vorhergesagte asymptotische Verhalten. Die in Gleichung (2.11) und der Tabelle 2.2

angegebenen B_α bestimmen ihre Steigungen. Ganz offensichtlich konvergieren die numerisch berechneten Reflektivitäten für hohe Energien gegen diese Geraden. Dieses Hochenergieverhalten könnte auch den Geraden gemäß Gleichung (2.14) entsprechen. Deren Steigungen $-2\pi/\alpha$ unterscheiden sich jedoch von denen der Gleichung (2.11) um bis zu 8% (für $\alpha = 4$). Die aus (2.14) abgeleiteten Geraden beschreiben damit leicht erkennbar das Hochenergieverhalten der Reflektivitäten nicht korrekt.

Zusammenfassend ändert sich das Verhalten des Logarithmus der Reflektivität von einer Proportionalität zu $k\beta_\alpha$ bei kleinen Energien zu einer Proportionalität zu $(k\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}$ bei großen Energien. Drückt man die Reflektivität daher in der allgemeinen Form

$$|R_\alpha| = \exp[-B(k\beta_\alpha)^\mu] \quad (2.17)$$

aus und bildet den doppelten Logarithmus dieser Form, so zeigt das Ergebnis

$$\log(-\log|R_\alpha|) = \log B + \mu \log(k\beta_\alpha) \quad (2.18)$$

die im Exponenten von (2.17) auftretende Potenz μ von k am deutlichsten, wenn $\log(-\log|R_\alpha|)$ als Funktion von $\log(k\beta_\alpha)$ geplottet wird. Die in Abbildung 2.1 berechneten Reflektivitäten $|R_\alpha|$ sind deswegen in Abbildung 2.2 nochmals in dieser doppellogarithmischen Darstellung aufgetragen. Für große negative Werte von $\log(k\beta_\alpha)$ (Schwellenbereich) nähert sich die Linie einer Gerade mit der Steigung eins. Ihr Schnittpunkt mit der Ordinate ist $\log(2b'_\alpha)$, siehe Gleichung (2.6) und Tabelle 2.1. Für große positive Werte von $\log(k\beta_\alpha)$ (Hochenergielimes) nähert sich die Linie einer Geraden mit der Steigung $1 - 2/\alpha$. Ihr Schnittpunkt mit der Ordinate liefert den Koeffizienten $\log(B_\alpha)$, siehe Gleichung (2.10) und Tabelle 2.2.

Erwähnenswert ist, dass bei homogenen Potenzialen die Darstellung $\log(-\log|R_\alpha|)$ als Funktion von $\log(k\beta_\alpha)$ formunabhängig von der Potenzialstärke β_α ist. Diese Unabhängigkeit von β_α hat ihren Ursprung darin, dass das homogene Potenzial keine charakteristische Länge besitzt. Eine Skalierung des Potenzials läßt das Potenzial unverändert. Die Reflektivitäten $|R_\alpha|$ sind monoton fallende Funktionen von $k\beta_\alpha$. Das bedeutet, dass für eine vorgegebene Energie (fester Wert für k) die Reflektivität mit sinkendem β_α steigt. Wird das Potenzial also schwächer gemacht, so steigt die Quantenreflektivität bei fester Energie E . Gleichzeitig verschiebt sich der Bereich, in dem Quantenreflexion stattfindet (d.h. wo der Absolutwert des Potenzials gleich der Energie E ist), gemäß Gleichung (2.8) in Richtung kleinerer Werte für r .

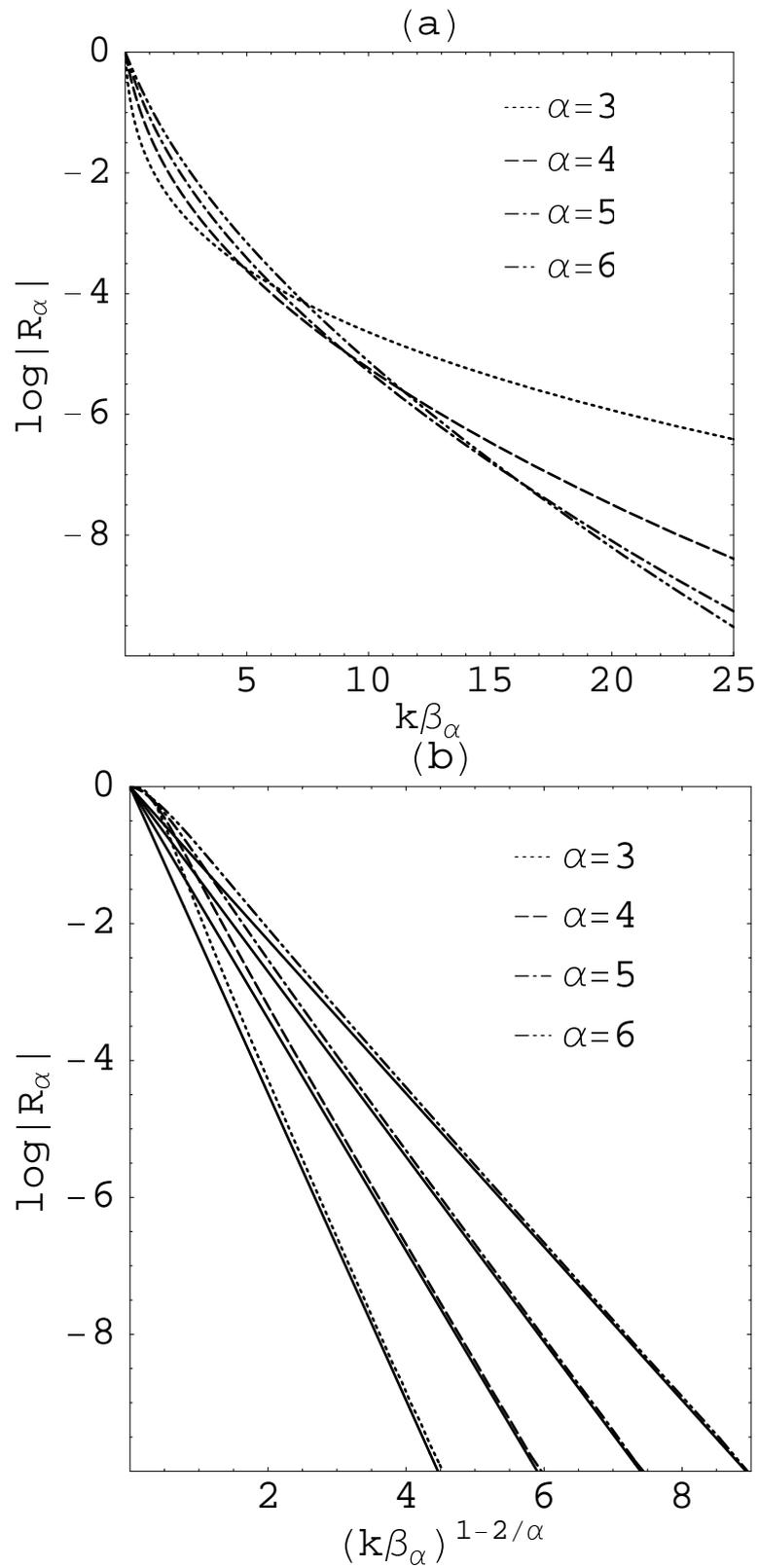


Abbildung 2.1: Reflektivitäten $|R_\alpha|$ homogener Potenzialschwänze (2.1) für Potenzen α von 3 bis 6. Die natürlichen Logarithmen $\log|R_\alpha|$ der Reflektivitäten sind als Funktion von $k\beta_\alpha$ in Teil (a) der Abbildung und als Funktion von $a_\alpha = (k\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}$ in Teil (b) geplottet.

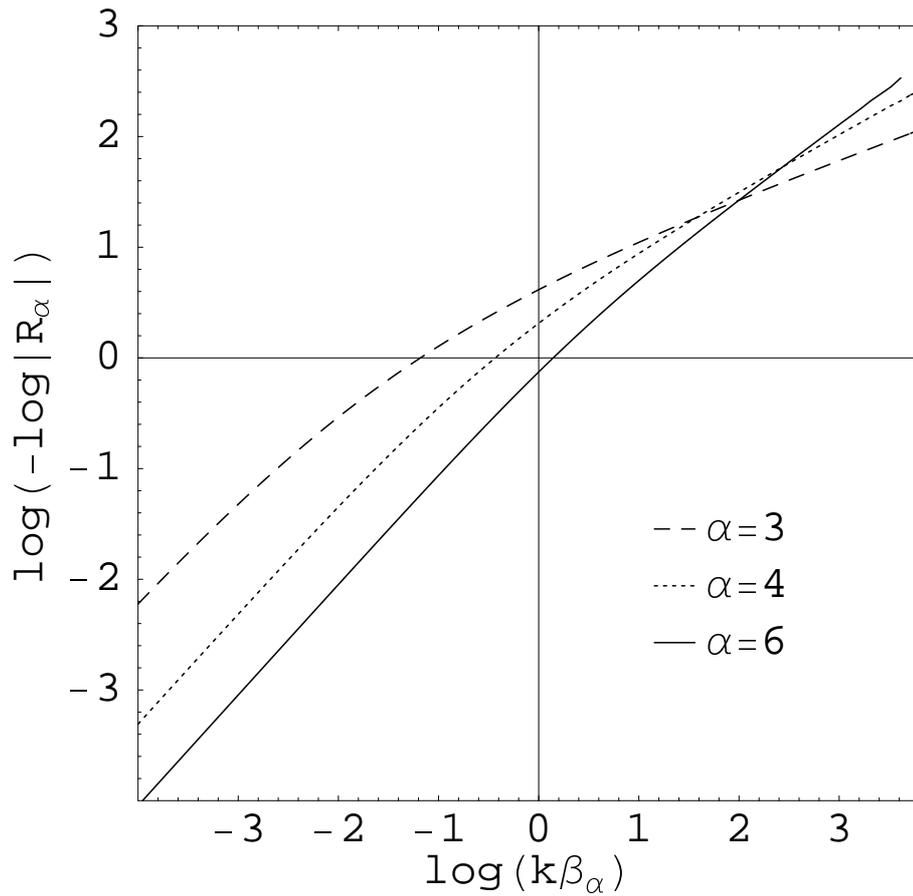


Abbildung 2.2: Reflektivitäten $|R_\alpha|$ homogener Potentialschwänze (2.1) für Potenzen $\alpha = 3, 4$ und 6 . Hier ist $\log(-\log|R_\alpha|)$ als Funktion von $\log(k\beta_\alpha)$ geplottet. Für große negative Werte von $\log(k\beta_\alpha)$ nähern sich die Kurven Geraden mit der Steigung eins, deren Schnittpunkte mit der Ordinate die Logarithmen von $2b'_\alpha$ geben (2.4). Für große positive Werte von $\log(k\beta_\alpha)$ nähern sich die Kurven Geraden mit der Steigung $1 - 2/\alpha$, deren Schnittpunkte mit der Ordinate die Logarithmen der Koeffizienten B_α (2.11) liefern, siehe auch Tabellen 2.2 und 3.1.

Kapitel 3

Quantenreflexion an inhomogenen Potenzialen

Im folgenden Abschnitt wird die Quantenreflexion am speziellen Beispiel des Casimir van der Waals Potentials als inhomogener Potentialtyp untersucht. Hierzu werden insbesondere die Ergebnisse aus dem vorhergehenden Kapitel zur Quantenreflexion an homogenen Potenzialen herangezogen. Wie gezeigt wird, lassen sich diese Ergebnisse auf bestimmte Bereiche des inhomogenen Potentials nahezu unmittelbar übertragen. Es werden detailliert Methoden angegeben, wie aus dem Reflektivitätsverhalten Rückschlüsse auf Potentialparameter des inhomogenen Potentials gezogen werden können. Die so am Beispiel des Casimir van der Waals Potentials gewonnenen Erkenntnisse werden im darauf folgenden Abschnitt auf Summenpotenziale und inverse Summenpotenziale verallgemeinert, die als Summen homogener Potentialanteile bzw. als Kehrwert solcher Summen darstellbar sind.

3.1 Quantenreflexion am Casimir van der Waals Potenzial

3.1.1 Skalierung der Schrödingergleichung

Das asymptotische Verhalten (1.53) und (1.54) des Casimir van der Waals Potentials enthält im Gegensatz zu den homogenen Potenzialen eine energieunabhängige intrinsische Länge

$$l \stackrel{\text{def}}{=} \frac{C_4}{C_3} = \frac{(\beta_4)^2}{\beta_3}. \quad (3.1)$$

Sie definiert eine natürliche Längenskala, die den kurzreichweitigen, $r \ll l$, vom langreichweitigen, $r \gg l$, Bereich des Casimir van der Waals Potentials trennt. Diese Längenskala legt es nahe, auch die Abstandskoordinate r in Einheiten dieser Länge l darzustellen, d.h. mit der dimensionslosen Koordinate $x = r/l$. Mit dieser Skalierung

wird auch ein Potenzialstärkeparameter K_0 eingeführt, der anschaulich die Stärke des Potenzials am Ort l angibt,

$$\frac{\hbar^2 (K_0)^2}{2M} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{C_3}{l^3} = \frac{C_4}{l^4}. \quad (3.2)$$

Das allgemeine Casimir van der Waals Potenzial lautet abhängig von der dimensionslosen Koordinate x und dem Potenzialstärkeparameter K_0 :

$$V_{CvdW}(r) = \frac{\hbar^2 (K_0)^2}{2M} v\left(\frac{r}{l}\right). \quad (3.3)$$

Sein asymptotisches Verhalten überträgt sich damit in folgendes asymptotisches Verhalten der dimensionslosen "Formfunktion" $v(x)$:

$$v(x) \stackrel{x \rightarrow 0}{\sim} -\frac{1}{x^3}, \quad v(x) \stackrel{x \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{1}{x^4}. \quad (3.4)$$

Das asymptotische Grenzverhalten (1.53) und (1.54) wird so durch die natürliche Länge l und den Potenzialstärkeparameter K_0 bestimmt. Diese Größen lassen sich mit den Längenparametern β_3 und β_4 wie folgt in Verbindung bringen:

$$K_0 = \frac{(\beta_3)^2}{(\beta_4)^3}, \quad l = \frac{(\beta_4)^2}{\beta_3}. \quad (3.5)$$

Mit diesen Definitionen lautet die skalierte Schrödingergleichung mit dem Casimir van der Waals Potenzial:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 + (K_0)^2 v\left(\frac{r}{l}\right) \right] \psi(r) = 0. \quad (3.6)$$

Definiert man einen weiteren Parameter, der sich als kritische Größe für die Abschätzung der relativen Wichtigkeit der beiden asymptotischen Grenzverhalten (1.53) und (1.54) für das Gesamtverhalten des inhomogenen Potenzials herausstellen wird, wie folgt,

$$\rho \stackrel{\text{def}}{=} K_0 l = \frac{\beta_3}{\beta_4} = \frac{\sqrt{2M}}{\hbar} \frac{C_3}{\sqrt{C_4}}, \quad (3.7)$$

so läßt sich die skalierte Schrödingergleichung als Funktion der dimensionslosen Koordinate x in folgende Form bringen:

$$\left[\frac{1}{\rho^2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{k^2}{K_0^2} + v(x) \right] \psi(x) = 0. \quad (3.8)$$

Sie hängt damit nur von der dimensionslosen Energie k^2/K_0^2 und dem kritischen Parameter ρ ab. Ein Vergleich mit der Schrödingergleichung (1.3) zeigt, dass der Parameter ρ die "Funktion" der Masse übernimmt. Für steigendes ρ sollten damit die Lösungen der skalierten Schrödingergleichung immer stärker semiklassischer Natur werden.

3.1.2 Modellpotenziale für das Casimir van der Waals Potenzial

Außer für den Fall des Wasserstoffatoms ist die exakte Form des Potentials zwischen den beiden asymptotischen Grenzverhalten (1.53) bei kurzen Distanzen und (1.54) bei großen Distanzen nicht bekannt. Shimizu's Analyse in [Shimizu, 2001] von an Silizium oder einer Glasoberfläche reflektierten angeregten Neon-Atomen (siehe auch Abschnitt 3.1.9) basiert auf einem vereinfachten Modellpotential mit der Formfunktion

$$V_1(r) = -\frac{C_4}{(r+l)r^3}. \quad (3.9)$$

Die reduzierte Darstellung lautet damit:

$$v_1(x) = -\frac{1}{x^3 + x^4}. \quad (3.10)$$

Ein Modellpotential mit einem sanfteren Übergang der Formfunktion von hohen zu niedrigen r gibt Holstein [Holstein, 2001] bei einem Überblick über Casimir van der Waals Potenziale zwischen zwei Atomen an. In der reduzierten Darstellung lautet die Formfunktion:

$$v_2(x) = -\frac{1}{x^3} \frac{2}{\pi} \arctan\left(\frac{\pi}{2x}\right). \quad (3.11)$$

Abbildung 3.1 zeigt die Funktionen $-x^3 v_{1,2}(x)$, die für $x = 0$ bei eins starten und sich für große x wie $1/x$ verhalten. Die Form des in [Marinescu, 1997] tabellierten Wasserstoff-Oberfläche-Potentials liegt zwischen den beiden Formen (3.10) und (3.11). Daher wurde eine weitere rationale Näherung $v_H(x)$ konstruiert, die das exakte Potential mit einem maximalen relativen Fehler von etwa 0.7% über den gesamten tabellierten Bereich nähert:

$$v_H(x) = -\frac{1}{x^3} \left(\frac{1 + 0.22x}{1 + 0.95x + 0.22x^2} \right). \quad (3.12)$$

Diese Formfunktion ist auch in Abbildung 3.1 dargestellt. Die ausgefüllten Quadrate zeigen die Werte, die dem in [Marinescu, 1997] tabellierten Potential entsprechen.

Allgemein können für eine Näherung der in Marinescu *et al.* [Marinescu, 1997] angegebenen Alkali-Oberfläche-Potentiale die Formfunktionen

$$v_A(x) = -\frac{1}{x^3} \left(\frac{1 + \zeta_A x}{1 + \eta_A x + \zeta_A x^2} \right) \quad (3.13)$$

herangezogen werden. Die Parameter dieser Formfunktionen sind für Lithium, Natrium, Kalium, Rubidium und Cäsium in Tabelle 3.1 aufgelistet. Die mit diesen Parametern definierten Formfunktionen geben die entsprechenden Alkali-Oberfläche-Potentiale aus [Marinescu, 1997] in allen Fällen mit einem maximalen relativen Fehler von weniger als 0.6% wieder. Die Ähnlichkeit der für die verschiedenen Atome ermittelten Parameter ζ_A und η_A in Tabelle 3.1 zeigt, dass die Formfunktionen für die auf Einelektronenmodell-Potenzialen basierenden Alkali-Oberfläche-Potentiale äußerst ähnlich sind.

	Li	Na	K	Rb	Cs
ζ_A	0.3	0.35	0.4	0.4	0.41
η_A	0.98	0.98	1	1	1

Tabelle 3.1: Parameter für die Formfunktion (3.13) der Casimir van der Waals Potentiale zwischen Alkalimetall-Atomen und einer leitenden Oberfläche. Die über die Gleichungen (3.3) und (3.13) definierten Potentiale mit diesen Formen und den Potenzialstärkeparametern der Tabelle 1.1 geben die von [Marinescu, 1997] auf einer Basis von Einelektronenmodell-Potenzialen erhaltenen Potentiale in allen Fällen mit einem maximalen relativen Fehler von weniger als 0.6% wieder.

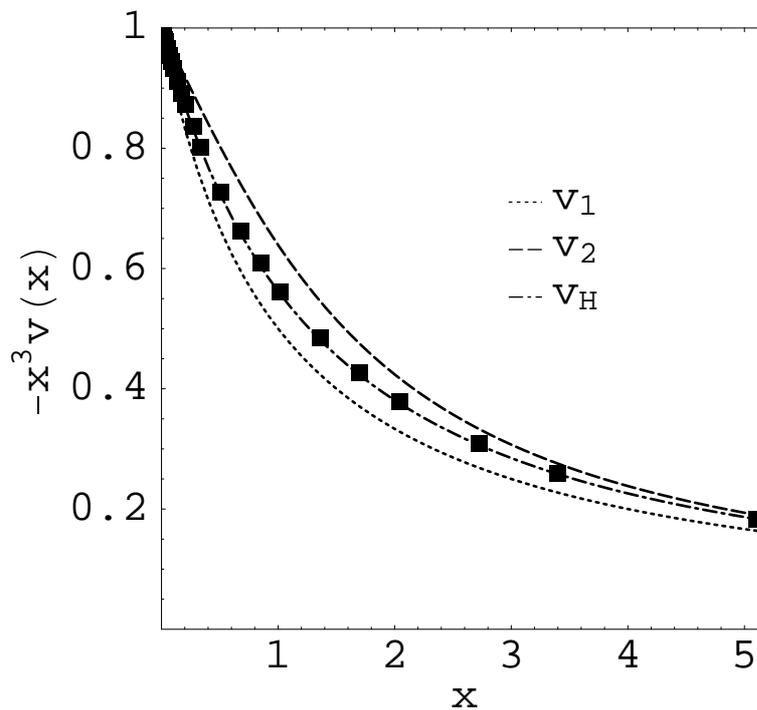


Abbildung 3.1: Formfunktionen $v_1(x)$ (Gleichung (3.10), gepunktete Linie), $v_2(x)$ (Gleichung (3.11), gestrichelte Linie) und $v_H(x)$ (Gleichung (3.12), strichgepunktete Linie). Für alle drei Funktionen ist die geplottete Größe $-x^3 v(x)$. Die Formfunktion $v_H(x)$ gibt die der exakten Wasserstoff-Oberfläche-Wechselwirkung entsprechenden Werte (ausgefüllte Quadrate), die von Marinescu *et al.* in [Marinescu, 1997] tabelliert sind, bis auf einen maximalen relativen Fehler von 0.7% wieder.

3.1.3 Badlandsfunktion

Mody *et al.* vermuten in [Mody, 2001], dass Quantenreflexion in Bereichen auftritt, in denen die WKB-Näherung zusammenbricht, und zwar nahe dem Punkt r_0 , bei dem der Absolutwert der Potenzialenergie gleich der (asymptotischen) Energie ist, d.h. der Gesamtenergie

$$|V(r_0)| = E = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}. \quad (3.14)$$

Für den homogenen Potenzienschwanz haben wir im Abschnitt 2.2 in Gleichung (2.8) gesehen, dass

$$r_0 = k^{-2/\alpha} (\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}. \quad (3.15)$$

Das Maximum der reduzierten Badlandsfunktion (1.11) liegt jedoch nach [Mody, 2001] gemäß

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2M} = |V_\alpha(r)| \frac{\alpha - 2}{2\alpha + 2} \quad (3.16)$$

bei

$$r_{\max,1} = \left(\frac{\alpha - 2}{2\alpha + 2} \right)^{1/\alpha} r_0. \quad (3.17)$$

Dies ist etwas geringer als die über (3.14) und (3.15) definierte Position r_0 , nämlich um einen Faktor 2 für $\alpha = 3$ und 1.5 für $\alpha = 4$. Für den homogenen Potenzienschwanz (2.1) ist die Badlandsfunktion (1.22)

$$B(r) = \frac{5\alpha^2 (\beta_\alpha)^{2\alpha-4}}{16r^{2\alpha+2} [k^2 + (\beta_\alpha)^{\alpha-2}/r^\alpha]^3} - \frac{\alpha (\alpha + 1 (\beta_\alpha)^{\alpha-2})}{4r^{\alpha+2} [k^2 + (\beta_\alpha)^{\alpha-2}/r^\alpha]^2}, \quad (3.18)$$

und Maxima von $|B(r)|$ treten auf, wenn

$$k^2 = F(\alpha) \frac{(\beta_\alpha)^{\alpha-2}}{r^\alpha}, \quad (3.19)$$

mit

$$F(\alpha) = \frac{5}{4} - \frac{9}{2\alpha + 4} \pm \frac{9}{4\alpha + 8} \sqrt{1 - \frac{20}{27} \left(\frac{\alpha + 2}{\alpha + 1} \right)}. \quad (3.20)$$

Die Positionen dieser Maxima liegen bei

$$r_{\max} = [F(\alpha)]^{1/\alpha} r_0, \quad (3.21)$$

wobei r_0 durch Gleichung (3.15) gegeben ist. Für $\alpha > 4$ ist die Funktion $B(r)$ bei $r = \frac{1}{4} [1 - 5/(\alpha + 1)]^{1/\alpha} r_0$ gleich Null. Ein größeres Maximum von $|B(r)|$ liegt oberhalb dieser Null und ein kleineres unterhalb davon. Für $\alpha = 3, 4$ ergibt nur das positive Vorzeichen vor der Wurzel in (3.20) einen positiven Wert von $F(\alpha)$, und zwar $F(3) = 0.7174$ und $F(4) = 1$, so dass $r_{\max} = 0.895r_0$ für $\alpha = 3$ und $r_{\max} = r_0$ für $\alpha = 4$ ist. Die Annahme, dass Quantenreflexion hauptsächlich in dem durch (3.14) definierten Bereich auftritt, wird also eher auf der Basis der Badlandsfunktion (1.22) als auf der reduzierten Badlandsfunktion (1.11) gerechtfertigt.

Für Casimir van der Waals Potenziale ist der Ausdruck für die Badlandsfunktion komplizierter. Ihr Verhalten für kleine und große r folgt allerdings unmittelbar aus (3.18), wenn man für $r \rightarrow 0$ in (3.18) $\alpha = 3$ und für $r \rightarrow \infty$ in (3.18) $\alpha = 4$ einsetzt:

$$B(r) \stackrel{r \rightarrow 0}{\sim} -\frac{3}{16} \frac{r}{\beta_3}, \quad B(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{5 (\beta_4)^2}{k^2 r^6}. \quad (3.22)$$

Die Abhängigkeit von $B(r)$ von den Potenzialstärkeparametern kann herauskaliert werden, indem die Badlandsfunktion geschrieben wird als

$$B(r) = \frac{1}{\rho^2} \tilde{B} \left(\frac{r}{l}, \frac{k}{K_0} \right). \quad (3.23)$$

K_0 , l und ρ sind die im Abschnitt 3.1.1 eingeführten Parameter (vgl. Gleichungen (3.2), (3.1) und (3.7)). Die skalierte Badlandsfunktion \tilde{B} hängt nur von der skalierten Koordinate r/l und der skalierten (asymptotischen) Wellenzahl k/K_0 ab (bzw. äquivalent von der skalierten Energie $(k/K_0)^2$). Selbstverständlich hängt sie auch vom zugrundegelegten Modellpotenzial ab.

Die skalierte Badlandsfunktion ist in Abbildung 3.2 als Funktion der dimensionslosen Koordinate $x = r/l$ für drei Werte der skalierten Energie gezeigt, und zwar für $(k/K_0)^2 = 0.1, 1.0$ und 10 . Als zugrundeliegendes Modellpotenzial wurde v_H gewählt, das die exakte Wasserstoff-Oberfläche-Wechselwirkung nähert. Die senkrechten Striche markieren die Punkte $x_0 = r_0/l$, wobei r_0 über Gleichung (3.14) bei der entsprechenden Energie berechnet ist. Die Abhängigkeit der Badlandsfunktion von der Potenzialform illustriert Abbildung 3.3, die \tilde{B} für die drei Formfunktionen v_1 (3.10), v_2 (3.11) und v_H (3.12) zeigt. Hier wurde die skalierte Energie auf $(k/K_0)^2 = 1$ gesetzt. Die senkrechten Striche markieren wieder die Punkte r_0/l . Die Abbildungen 5 und 6 zeigen, dass die Bedingung (3.14) die Position des Maximums der Badlandsfunktion nicht nur für homogene Potenzial, sondern auch für das Casimir van der Waals Potenzial (ungefähr) wiedergibt.

Um ein etwas anschaulicheres Bild über den Zusammenhang zwischen Ort des Maximums und Ausdehnung der Badlandsfunktion zur Energie des Teilchens zu bekommen, ist in Abbildung 3.4 der Verlauf des skalierten Ortes des Maximums r_{\max}/l der Badlandsfunktion (1.22) als Funktion des Logarithmus der skalierten Wellenzahl k/K_0 mit einer gepunkteten Linie gezeichnet. Ferner ist der Verlauf des dimensionslosen komplexen Umkehrpunktes r_0/l ebenfalls als Funktion des Logarithmus der skalierten Wellenzahl k/K_0 mit einer gestrichelten Linie dargestellt. Als Modellpotenzial diente v_1 . Über den gesamten Bereich sind r_{\max}/l und r_0/l nicht voneinander zu unterscheiden. Die Balken in der Abbildung 3.4 geben die Ausdehnung der Badlandsfunktion zu diskreten Energiewerten wieder. Die Balkenenden markieren die beiden Punkte beidseits des skalierten Badlandsmaximums r_{\max}/l , bei denen die Badlandsfunktion (1.22) auf 10% ihres maximalen Wertes abgefallen ist. Die Abbildung 3.5 zeigt ein ähnliches Bild der genannten Badlandsfunktion mit v_1 in einer Graustufendarstellung, die deutlich macht, wie das Maximum der Badlandsfunktion mit steigender Energie näher an den Ursprung heranrückt und wie die Funktion selbst sich dabei immer stärker um dieses Maximum lokalisiert. Dunklere Bereiche entsprechen höheren Funktionswerten der Badlandsfunktion und hellere Bereiche niedrigeren Werten.

Da der Reflexionsbereich für steigende Energien immer stärker lokalisiert wird, ist es sinnvoll zu untersuchen, wie gut ein homogenes Potenzial das Gesamtpotenzial

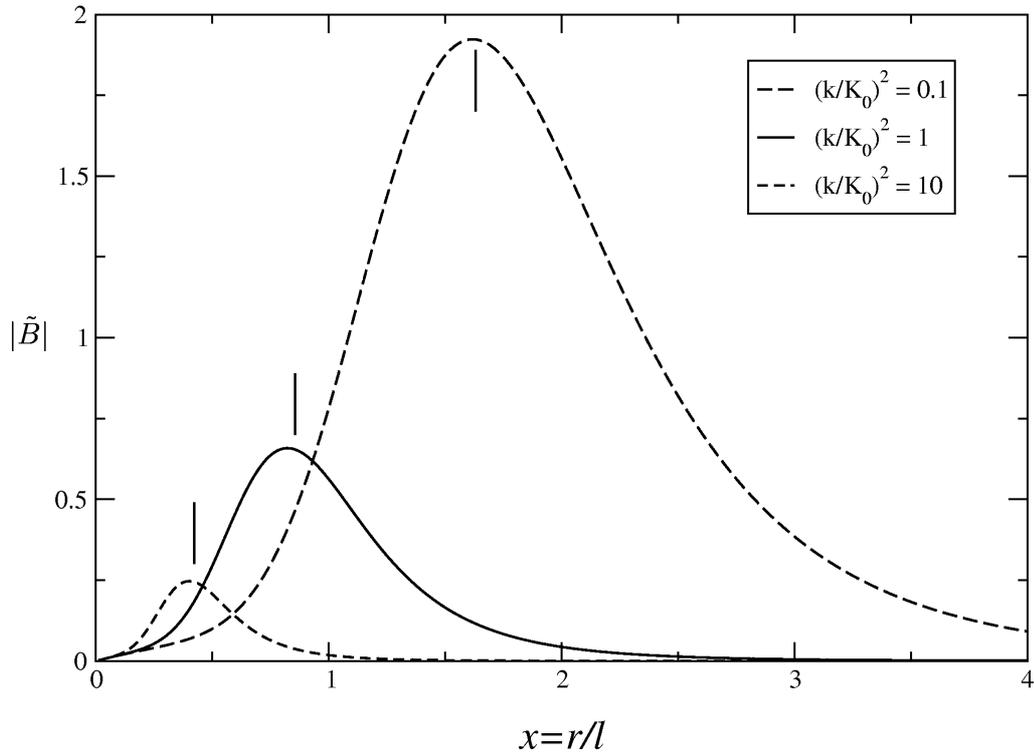


Abbildung 3.2: Skalierte Badlandsfunktion \tilde{B} , wie sie in Gleichungen (1.22) und (3.23) als Funktion der dimensionslosen Koordinate $x = r/l$ für die skalierten Energien $(k/K_0)^2 = 0.1$ (langgestrichelte Linie), 1.0 (durchgezogene Linie) und 10 (kurzgestrichelte Linie) definiert ist. Die Formfunktion ist die aus Gleichung (3.12), die die exakte Wasserstoff-Oberfläche-Wechselwirkung nähert. Die vertikalen Striche markieren die Punkte $x_0 = r_0/l$, wo die Bedingung (3.14) bei den jeweiligen (skalierten) Energien erfüllt ist.

in diesem lokalisierten Reflexionsbereich nähert. Hierzu wurden die relativen Abweichungen der homogenen Näherung an das Gesamtpotenzial an den Orten untersucht, an denen das Maximum der Badlandsfunktion liegt und an denen die Badlandsfunktion auf einen bestimmten Wert bezüglich dieses Maximums abgefallen ist. Die Untersuchung ist in Abbildung 3.6 mit den asymptotischen homogenen Näherungen (1.53) (van der Waals Potenzial) und (1.54) (Casimir Potenzial) für das Gesamtpotenzial v_1 durchgeführt worden. Die gestrichelte Linie gibt die relative Abweichung der Näherung (1.53) vom Potenzial v_1 am Ort des Maximums r_{\max} der Badlandsfunktion für v_1 als Funktion des Logarithmus der skalierten Wellenzahl k/K_0 an. Die Balkenenden der senkrechten Balken markieren eine entsprechende relative Abweichung bei den Orten, bei denen die Badlandsfunktion auf 10% ihres maximalen Wertes $B(r_{\max})$ abgefallen ist, und zwar wiederum zu diskreten Werten von k/K_0 . Die gepunktete Linie zeigt die gleichen Abweichungen für die Näherung (1.54). Die Abweichung ist logarithmisch aufgetragen, wobei der Nullpunkt auf eine 100% Ab-

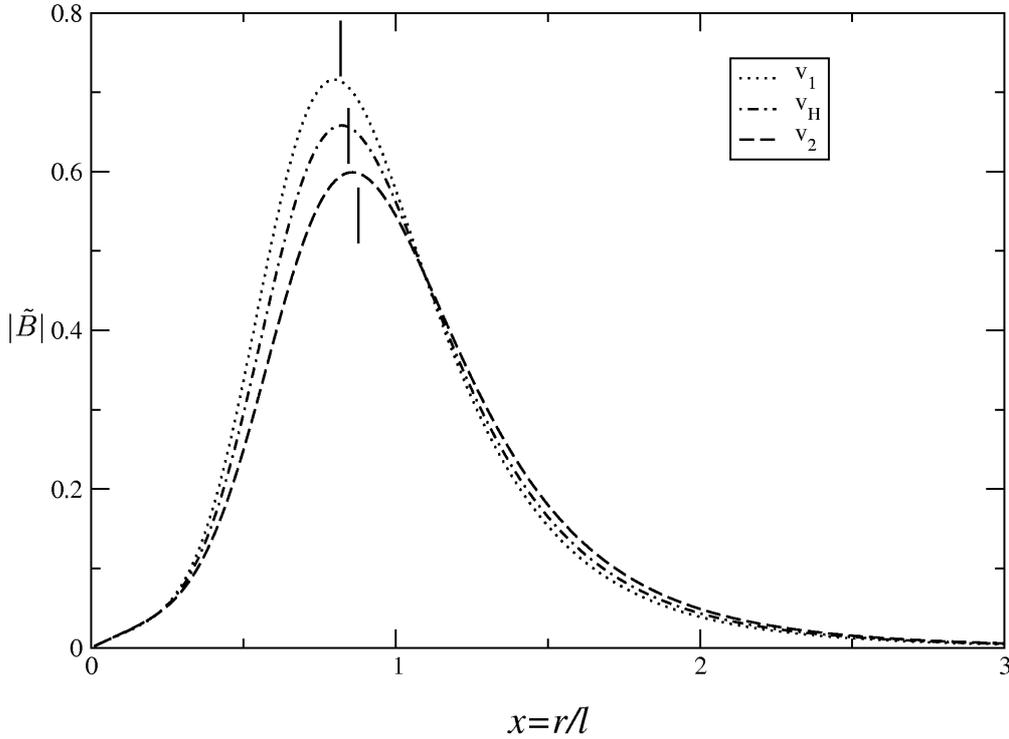


Abbildung 3.3: Skalierte Badlandsfunktion \tilde{B} , wie sie in Gleichungen (1.22) und (3.23) als Funktion der dimensionslosen Koordinate $x = r/l$ für die drei Formfunktionen v_1 (Gleichung (3.10), gepunktete Linie), v_2 (Gleichung (3.11), gestrichelte Linie) und v_H (Gleichung (3.12), strichgepunktete Linie) definiert ist. Die skalierte Energie ist $(k/K_0)^2 = 1$ und die vertikalen Striche markieren die Punkte $x_0 = r_0/l$, wo die Bedingung (3.14) bei den jeweiligen Potenzialen erfüllt ist.

weichung gelegt wurde. Das bedeutet, dass alle Punkte oberhalb der Koordinatenachse Abweichungen größer als 100% kennzeichnen, und unterhalb davon kleiner als 100%. Vor dem Kreuzungsbereich der beiden "Fehlerbänder", also hin zu niedrigen Energien und damit zu großen Abständen, sollte die Quantenreflexion durch die Näherung (1.54) beschreibbar sein, da ihre Abweichung vom Gesamtpotenzial dort vernachlässigbar wird. Dies gilt selbstverständlich nur solange die Energie gleichzeitig größer als die für das Schwellenverhalten (2.6) maßgeblichen Energien ist. Nach dem Kreuzungsbereich, also hin zu großen Energien und kleinen Abständen, sollte die Quantenreflexion aus dem gleichen Grund allein von der Näherung (1.53) dominiert werden. Im Kreuzungsbereich wird die Quantenreflexion entscheidend vom tatsächlichen Potenzialverlauf abhängen, und die Vorhersagen mit den Näherungen (1.53) und (1.54) sind wahrscheinlich schlecht. Die Abbildung 3.6 zeigt zwar nicht den Übergang vom Niederenergie- in das Hochenergieverhalten der Reflektivität. Wie in nachfolgenden Abschnitten jedoch plausibel gemacht wird, dominiert das Schwellenverhalten unterhalb von Energien, für die $k/K_0 \ll 1/\rho^2$ gilt. Für den Parameter

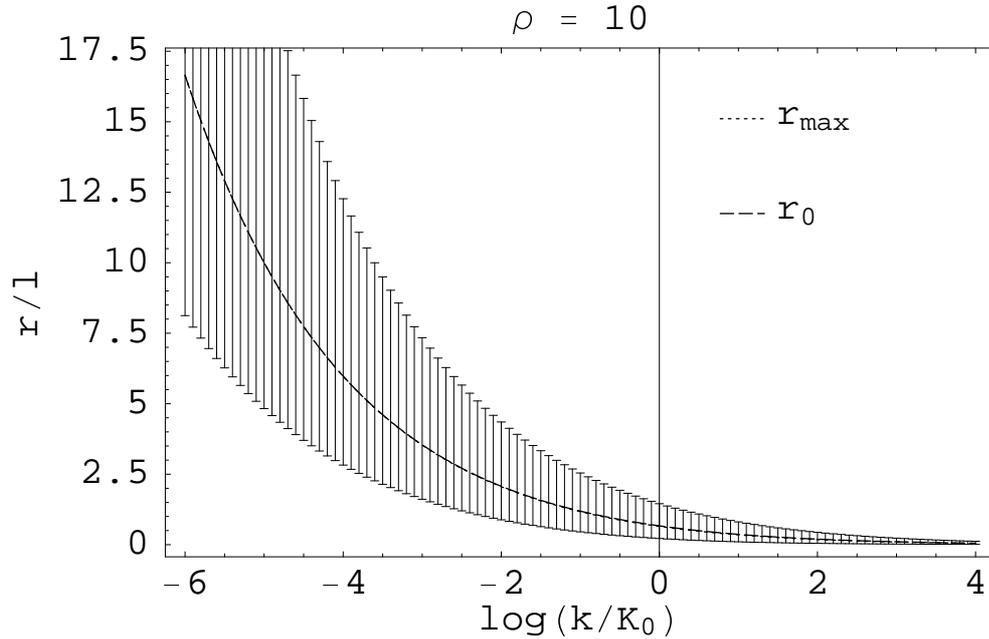


Abbildung 3.4: Verlauf des Ortes des skalierten Maximums r_{\max}/l (gepunktete Linie) der skalierten Badlandsfunktion \tilde{B} , wie sie in Gleichungen (1.22) und (3.23) definiert ist, sowie des skalierten komplexen Umkehrpunktes r_0/l (gestrichelte Linie) als Funktion des Logarithmus der skalierten Wellenzahl $\log(k/K_0)$ für die Formfunktion v_1 (3.10). Die Balken geben die Ausdehnung der Badlandsfunktion zu diskreten Werten von $\log(k/K_0)$ wieder. Die Balkenenden markieren die beiden Punkte beidseits des Badlandsmaximums r_{\max}/l , bei denen die Badlandsfunktion \tilde{B} auf 10% ihres maximalen Wertes $\tilde{B}(r_{\max}/l)$ abgefallen ist.

ρ wurde bei der Berechnung der Wert 10 gewählt, so dass das Schwellenverhalten für $\log(k/K_0) \ll -2$ einsetzen sollte. Ferner sollten die Darstellungen der Abbildung 3.6 als Funktion des Logarithmus der skalierten Wellenzahl k/K_0 nahezu unabhängig vom Parameter ρ sein. Der Kreuzungsbereich der "Fehlerbänder" wird vermutlich immer bei $\log(k/K_0)$ etwa gleich Null liegen. Dies zeigen Überlegungen in den nachfolgenden Abschnitten. Somit kann an dieser Stelle bereits bemerkt werden, dass der Parameter ρ festlegt, ob das durch (1.54) vorhergesagte Reflektivitätsverhalten sichtbar wird. Für genügend hohe ρ verschiebt sich der Übergangsbereich vom Schwellenverhalten in das Hochenergieverhalten nämlich hin zu kleineren Werten für k/K_0 . Wenn diese Werte genügend klein sind, so wird die Näherung (1.54) die Reflektivität des Casimir van der Waals Potenzials über einen endlichen Energiebereich bestimmen. Das von (1.53) hervorgerufene Reflektivitätsverhalten wird immer für ausreichend hohe Energien eintreten, und zwar für $k/K_0 \gg 1$.

Zusammenfassend gibt bereits eine leicht durchzuführende Analyse der Badlandsfunktion erste Anhaltspunkte für das zu erwartende Reflektivitätsverhalten eines beliebigen Potenzials, wenn nur Näherungen für das Potenzial bekannt sind, die zumindest abschnittsweise gelten und deren Reflektivitätsverhalten bekannt ist.

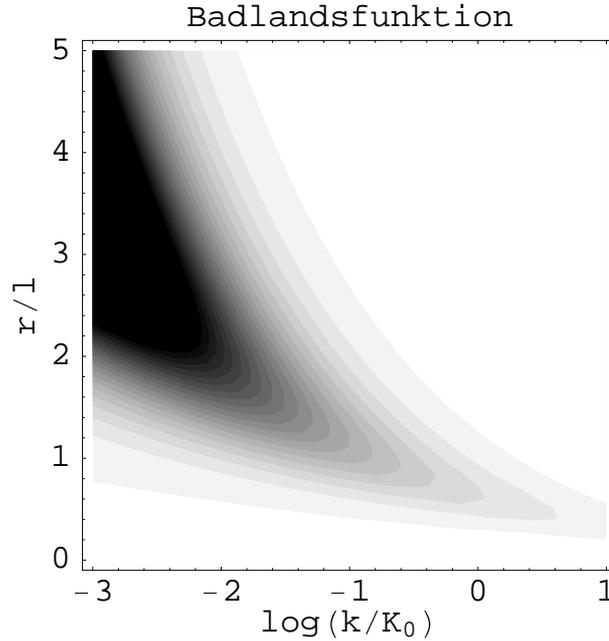


Abbildung 3.5: Skalierte Badlandsfunktion \tilde{B} , wie sie in Gleichungen (1.22) und (3.23) definiert ist, als Funktion des Logarithmus der skalierten Wellenzahl $\log(k/K_0)$ für die Formfunktion v_1 (3.10). Dunklere Felder entsprechen höheren Funktionswerten und hellere niedrigeren Werten.

3.1.4 Schwellenverhalten der Quantenreflexion für das Casimir van der Waals Potenzial

Schwellenverhalten für das Modellpotenzial v_1

Mit der Methode aus Abschnitt 1.3 läßt sich für das dimensionslose Potenzial

$$v_1(x) = -\frac{1}{x^3 + x^4} \quad (3.24)$$

der Längenparameter b_{v_1} analytisch berechnen, der das Schwellenverhalten der Quantenreflexion beschreibt. Die zugehörige dimensionslose Schrödingergleichung (3.8) besitzt nämlich an der Schwelle ($k = 0$) analytische Lösungen [Polyanin, 1996]. Wie im Anhang A näher erläutert, ist der Längenparameter des Potenzials mit diesen Lösungen gleich

$$b_{v_1} = \frac{\rho}{K_0} \frac{1/\pi}{J_1(2\rho)^2 + Y_1(2\rho)^2}. \quad (3.25)$$

Er entspricht dem dimensionslosen Längenparameter

$$b'_{v_1} \stackrel{def}{=} \frac{b_{v_1}}{l} = \frac{1/\pi}{J_1(2\rho)^2 + Y_1(2\rho)^2}. \quad (3.26)$$

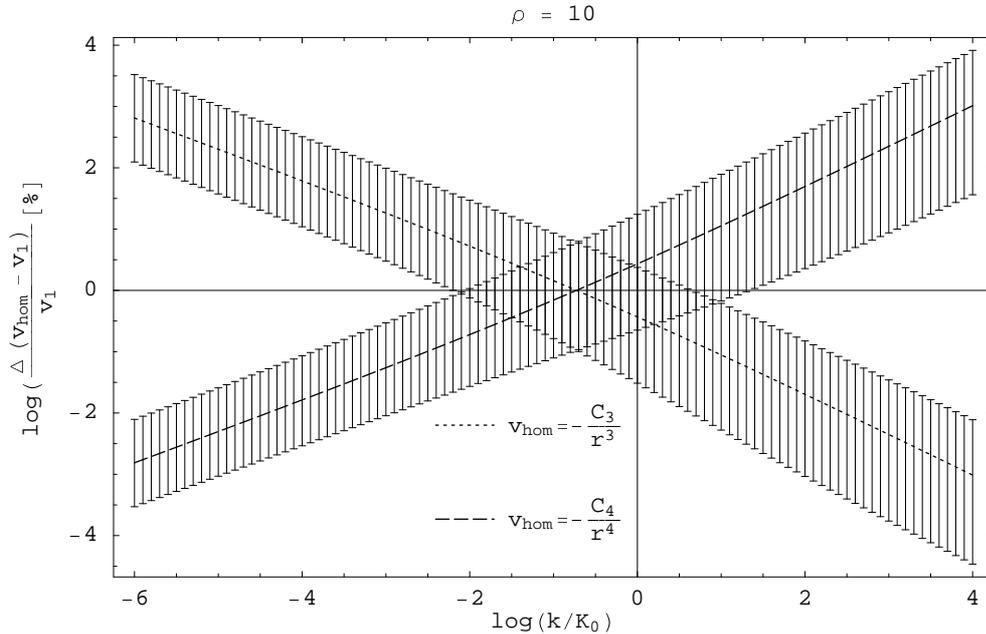


Abbildung 3.6: Relative Abweichungen der Näherungen (1.53) (gepunktete Linie) (1.54) (gestrichelte Linie) vom Potenzial v_1 am Ort des Maximums r_{\max} der Badlandsfunktion B als Funktion des Logarithmus der skalierten Wellenzahl k/K_0 . Die Balkenenden der senkrechten Balken markieren eine entsprechende relative Abweichung bei den Orten der Badlandsfunktion, bei denen sie auf 10% ihres maximalen Wertes $B(r_{\max})$ abgefallen ist. Der Parameter ρ ist gleich 10.

Die Definition (3.7) von ρ macht in Verbindung mit der Darstellung des Potentials in der Form

$$V_1(r) = -\frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{r^3}{\beta_3} + \frac{r^4}{(\beta_4)^2} \right]^{-1} \quad (3.27)$$

deutlich, dass der Parameter ρ den Einfluß der beiden asymptotisch geltenden homogenen Potentiale, das $-1/r^3$ -Potential und das $-1/r^4$ -Potential, auf das inhomogene Gesamtpotenzial angibt. Für den Fall $\rho \rightarrow 0$, der $\beta_3 \ll \beta_4$ entspricht, sollte gemäß (3.27) das inhomogene Gesamtpotenzial vom Verhalten des homogenen $-1/r^3$ -Potentials dominiert werden, während für den Fall $\rho \rightarrow \infty$, der $\beta_4 \ll \beta_3$ entspricht, das homogene $-1/r^4$ -Potential das Verhalten des inhomogenen Gesamtpotentials dominieren sollte.

Diese Überlegung wird auch vom Grenzverhalten des Längenparameters b_{v_1} gestützt, der für $\rho \rightarrow 0$ den Wert $\pi\beta_3$ des Längenparameters b_α des homogenen $-1/r^3$ -Potentials annimmt (vgl. Gleichung (2.4) und Tabelle 2.1),

$$b_{v_1} \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \frac{\rho}{\pi K_0} / \left(\frac{1}{\pi \rho} \right)^2 = \pi \frac{\rho^3}{K_0} = \pi \beta_3, \quad (3.28)$$

und für $\rho \rightarrow \infty$ den Wert β_4 für das homogene $-1/r^4$ -Potential,

$$b_{v_1} \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{\rho}{\pi K_0} / \frac{1}{\pi \rho} = \frac{\rho^2}{K_0} = \beta_4. \quad (3.29)$$

Zusammenfassend hängen die Eigenschaften der Reflektivität nahe der Schwelle entscheidend vom Parameter ρ ab. Die Reflektivität ist dort gemäß (2.6):

$$|R_{v_1}| \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \exp[-2b_{v_1} k] = \exp\left[-2b'_{v_1} \rho \frac{k}{K_0}\right]. \quad (3.30)$$

Die für das Schwellenverhalten geltende Näherung (3.30) ist solange gültig, solange ihr Exponent klein gegenüber eins ist, also $2b'_{v_1} \rho k / K_0 \ll 1$ bzw. $k / K_0 \ll 1 / (2b'_{v_1} \rho)$. Die gemäß (3.26) definierte Funktion $b'_{v_1}(\rho)$ ist auf einen Wertebereich zwischen Null (für $\rho \rightarrow 0$) und ρ (für $\rho \rightarrow \infty$) beschränkt. Setzt man für b'_{v_1} also ihren maximalen Wert ρ ein und vernachlässigt den Faktor 2, so erhält man als hinreichende Bedingung für die Gültigkeit der Näherung (3.30) die Abschätzung:

$$\frac{k}{K_0} \ll \frac{1}{\rho^2}, \quad \frac{E}{E_0} \ll \frac{1}{\rho}. \quad (3.31)$$

Der durch (3.31) gegebene Übergang zwischen Schwellen- und Hochenergieverhalten auf einer Skala der dimensionslosen Wellenzahl k/K_0 bzw. Energie E/E_0 verschiebt sich in den Grenzfällen $\rho \rightarrow 0$ hin zu höheren k -Werten und für $\rho \rightarrow \infty$ hin zu kleineren k -Werten. **Schwellenverhalten der beiden Modellpotenziale v_2 und v_H**

Für die Formfunktionen v_2 und v_H sind keine analytischen Lösungen der Schrödingergleichung bei der Energie Null bekannt. Das Schwellenverhalten wurde daher numerisch berechnet. Hierzu wurden erst die Reflexionskoeffizienten für den Niederenergiebereich mit dem im Abschnitt 1.2 beschriebenen Verfahren ermittelt. Anschließend wurden die Längenparameter b_{v_2} und b_H durch Anpassen der ermittelten Reflexionskoeffizienten an die Exponentialform (2.6) abgeleitet.

Die so numerisch berechneten Längenparameter b_{v_2} und b_H für die Formfunktionen v_2 und v_H sowie der analytisch nach (3.25) berechnete Längenparameter b_{v_1} für die Formfunktion v_1 sind als Funktion des Parameters ρ in Abbildung 3.7 dargestellt. Gemäß (3.7) und (3.8) ist der Parameter ρ ja auch für die Modellpotenziale (3.11) und (3.12) eine sinnvolle Definition. Die gepunktete Linie beschreibt die Formfunktion v_1 , die gestrichelte Linie die Formfunktion v_2 und die strichgepunktete Linie die Formfunktion v_H .

Wie aus Abbildung 3.7 ersichtlich wird, nehmen die Längenparameter unabhängig von der Formfunktion für $\rho \rightarrow 0$ den Wert $\pi\beta_3$ für das homogene $-1/r^3$ -Potential und für $\rho \rightarrow \infty$ den Wert β_4 für das homogene $-1/r^4$ -Potential an. Unterschiede zwischen den ρ -abhängigen Längenparametern sind im Übergang zwischen diesen beiden Grenzverhalten zu erkennen. Für $\rho \rightarrow \infty$ nimmt nur der Längenparameter für

die Formfunktion v_1 den Wert β_4 monoton steigend an, für die beiden Formfunktionen v_2 und v_H hat er ein Maximum bei $\rho \approx 1$ und nähert sich anschließend für $\rho \rightarrow \infty$ von oben dem Wert β_4 . Beim Wertebereich $\rho \approx 1$ unterscheiden sich die Längenparameter der einzelnen Formfunktionen auch am stärksten. Der größte Unterschied zwischen den wertemäßig am weitesten auseinander liegenden Längenparametern der beiden Formfunktionen v_1 und v_2 liegt bei $\rho \approx 0.63$ und beträgt dort 19%. Die "realistischere" Formfunktion v_H unterscheidet sich von den "modellhafteren" Formfunktionen v_1 und v_2 jeweils um maximal 10%.

3.1.5 Quantenreflexion bei hohen Energien

Wie im Abschnitt 3.1.3 erläutert wurde, verschiebt sich das Maximum der Badlandsfunktion bei steigenden Energien in Richtung kleinere Abstände r . Ihre Breite verringert sich dabei zunehmend. Für die spezielle Formfunktion (3.10) ist weiterhin gezeigt worden, dass das Maximum ihrer Badlandsfunktion etwa am Ort r_0 liegt, bei dem $|V(r_0)| = E$ gilt. Wenn man also die Energie nur genügend hoch macht, erreicht man immer den Fall $r_0 \ll l$. Die Reflexion sollte bei diesen Energien nur noch vom asymptotisch für $r \ll l$ geltenden van der Waals Potenzialanteil dominiert werden. Daher erwarten wir, dass das Reflektivitätsverhalten des "gemischten" Potenzials (z.B. v_1 , v_2 oder v_H) bei genügend hohen Energien in das Reflektivitätsverhalten eines reinen $-1/r^3$ -Potenzials übergeht. In diesem Energiebereich sollte damit

$$|R_{CvdW}| \stackrel{k \rightarrow \infty}{\sim} \exp \left[-B_3 (k\beta_3)^{1/3} \right] = \exp \left[-B_3 \rho \left(\frac{k}{K_0} \right)^{1/3} \right] \quad (3.32)$$

das Reflektivitätsverhalten des Casimir van der Waals Potenzials unabhängig vom zugrundegelegten Modellpotenzial beschreiben. Mit Gleichung (2.8) läßt sich für $\alpha = 3$ gemäß $k^{-2/3} (\beta_3)^{1/3} = r_0 \ll l$ ein Energiebereich abschätzen, in dem die Formel (3.32) die Reflektivität näherungsweise wiedergibt,

$$k\beta_3 \gg \left(\frac{\beta_3}{\beta_4} \right)^3 = \rho^3. \quad (3.33)$$

Dies entspricht der Bedingung

$$\frac{k}{K_0} \gg 1. \quad (3.34)$$

Die Abschätzung zeigt, dass die Näherung (3.32) für jeden fest vorgegebenen Parameterwert ρ gut ist, wenn nur die Energie genügend hoch wird. Selbstverständlich gilt die letzte Behauptung nur bei Vernachlässigung etwaiger kurzreichweitiger abstoßender Potenzialanteile bzw. Oberflächeneffekte. Für zu hohe Parameterwerte ρ kann die Situation eintreten, dass das durch Gleichung (3.32) beschriebene Reflektivitätsverhalten erst zu nahe an der Oberfläche einsetzt und dort von Oberflächeneffekten überlagert wird. Der Vollständigkeit halber sei nochmals bemerkt,

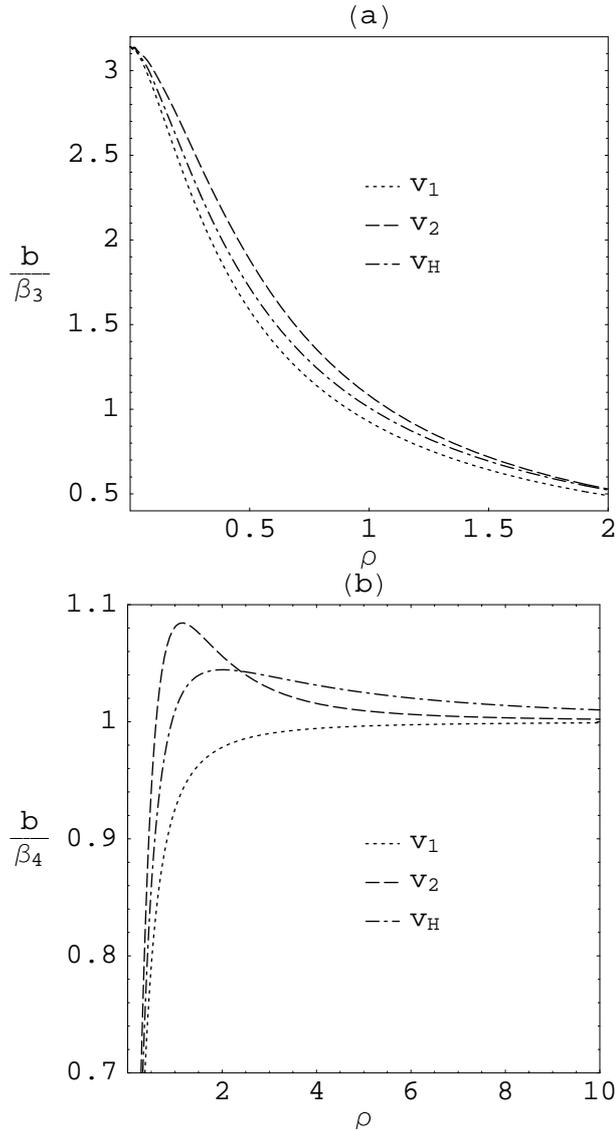


Abbildung 3.7: Längenparameter b , der das schwelennahe Reflektivitätsverhalten des Casimir van der Waals Potenzialschwanzes gemäß Gleichung (3.25) beschreibt. Teil (a) zeigt das Verhältnis b/β_3 , das nach Gleichung (2.4) für ein homogenes $-1/r^3$ -Potenzial gleich π sein würde. Teil (b) zeigt das Verhältnis b/β_4 , das nach Gleichung (2.4) für ein homogenes $-1/r^4$ -Potenzial gleich eins sein würde. Die gepunkteten Linien geben die Ergebnisse für die Formfunktion (3.10), die gestrichelten Linien für (3.11) und die strichgepunkteten Linien für (3.12) an.

dass das durch (3.32) beschriebene Hochenergieverhalten grundsätzlich erst bei Energien $k\beta_3 \gg 1$ bzw. $k/K_0 \gg 1/\rho^2$ (3.31) eintritt.

Wie im Abschnitt 3.1.3 bereits angesprochen, kann beim Übergang vom Niederenergieverhalten (3.30) in das Hochenergieverhalten aber auch folgender Fall eintreten. Das Maximum der Badlandsfunktion und damit näherungsweise auch r_0 liegt für

einen endlichen Energiebereich noch so weit vom Ursprung entfernt, dass $r_0 \gg l$ gilt. Der Abschnitt 3.1.3 hat ferner gezeigt, dass der Hochenergiebereich der Reflektivität auch durch verhältnismäßig stark räumlich begrenzte Reflexionsbereiche gekennzeichnet ist (im Gegensatz zum sich im wesentlichen über den gesamten Potenzienschwanz jenseits des inneren WKB-Bereichs ausdehnenden Badlandsbereich an der Schwelle). Wir erwarten für diesen endlichen Energiebereich, dass die Gleichung

$$|R_{CvdW}| \approx \exp \left[-B_4 (k\beta_4)^{1/2} \right] = \exp \left[-B_4 \rho \left(\frac{k}{K_0} \right)^{1/2} \right] \quad (3.35)$$

die Reflektivität richtig wiedergibt. Wegen der Bedingung $r_0 \gg l$ läßt sich der endliche Energiebereich, in dem (3.35) eine Näherung für die Reflektivität ist, wieder über Gleichung (2.8) (für $\alpha = 4$) entsprechend $\sqrt{k} \ll \sqrt{\beta_4}/l = \beta_3/(\beta_4)^{3/2}$ abschätzen zu

$$k\beta_4 \ll \left(\frac{\beta_3}{\beta_4} \right)^2 = \rho^2. \quad (3.36)$$

Konsistent mit der Bedingung (3.34) läßt sich (3.36) mit der dimensionslosen Wellenzahl k/K_0 auch schreiben als

$$\frac{k}{K_0} \ll 1. \quad (3.37)$$

Für die untere Grenze dieses endlichen Energiebereichs gilt wieder die Forderung $k\beta_4 \gg 1$ bzw. $k/K_0 \gg 1/\rho^2$ (3.31). Die Bedingungen (3.31) und (3.37) können nur dann gleichzeitig erfüllt sein, wenn $\rho \gg 1$ ist.

3.1.6 Gesamtverhalten der Reflektivität

Fügen wird die in den Abschnitten 3.1.4 und 3.1.5 für die beiden unterschiedlichen Energiebereiche gewonnenen Erkenntnisse zusammen, so erwarten wir über einen genügend großen auf einer logarithmischen Skala aufgetragenen Energiebereich folgendes Gesamtverhalten. Bei niedrigen Energien zeichnet sich die Reflektivität $-\log |R_{CvdW}|$ durch eine lineare Abhängigkeit von k und daran anschließend zu höheren Energien durch eine Abhängigkeit von $k^{1/3}$ aus. Wie der Übergang genau stattfindet, wird vom Parameter ρ festgelegt. Für kleine ρ sollte aufgrund der Ungleichung (3.36), die dann nicht gleichzeitig mit der Hochenergieforderung $k\beta_4 \gg 1$ erfüllt werden kann, das Gesamtverhalten des inhomogenen Potentials über den gesamten Energiebereich nicht von dem in Abbildung 2.2 für $\alpha = 3$ geplotteten Reflexionsverhalten für das homogene $-1/r^3$ -Potential unterscheidbar sein. Für niedrige Energien wird es durch (3.30) mit $b_{v_1} = \pi\beta_3$ (Grenzwert für kleine ρ) und für hohe Energien durch (3.32) beschrieben.

Für ausreichend große ρ erhalten wir einen endlichen Energiebereich, für den beide Ungleichungen (3.36) und $k\beta_4 \gg 1$ erfüllt sind. In diesem Energiebereich ist die Reflektivität durch (3.35) gegeben und $-\log |R_{CvdW}|$ somit proportional zu

\sqrt{k} . Zu höheren Energien hin, für die (3.33) gilt, sollte die Reflektivität in das durch (3.32) beschriebene Verhalten übergehen und $-\log |R_{CvdW}|$ somit proportional zu $k^{1/3}$ werden. Dieser Übergang kann an dem Ort erwartet werden, an dem sich die beiden durch die Gleichungen (3.35) und (3.32) in der doppellogarithmischen Darstellung ergebenden Geraden schneiden, d.h. wo $B_4 (k\beta_4)^{1/2} = B_3 (k\beta_3)^{1/3}$ gilt. Dieser Punkt liegt bei einer Energie von

$$\frac{k_{Schnitt}}{K_0} = \frac{k\beta_4}{\rho^2} = \frac{k\beta_3}{\rho^3} = \left(\frac{B_3}{B_4}\right)^6 = 5.345 \quad (3.38)$$

zwischen den beiden Bereichen, die durch (3.32) und (3.35) gekennzeichnet sind. Am Schnittpunkt der beiden Geraden sind die Reflektivität des homogenen $-1/r^4$ -Potenzials und die des homogenen $-1/r^3$ -Potenzials gleich groß und gleich

$$|R_{Schnitt}| = \exp\left(-B_4 (k_{Schnitt}\beta_4)^{1/2}\right) = \exp\left(-B_3 (k_{Schnitt}\beta_3)^{1/3}\right) = \exp(-3.92\rho). \quad (3.39)$$

Im Übergangsbereich gelten zwar die Gleichungen (3.32) und (3.35) nicht, der Wert (3.39) kann jedoch als grobe Abschätzung der Größenordnung der Reflektivität nahe der durch Gleichung (3.38) gegebenen Energie herangezogen werden.

3.1.7 Vergleich der analytischen mit numerischen Lösungen

Zum Untersuchen der in den vorigen Abschnitten gemachten Näherungen auf ihre Richtigkeit sind die Reflexionskoeffizienten mit dem im Abschnitt 1.2 beschriebenen Verfahren für mehrere Werte von ρ numerisch berechnet worden. Die dabei erhaltene Energieabhängigkeit der numerisch berechneten Reflektivität ist in den Abbildungen 11 bis 13 entsprechend der im Abschnitt 2.3 eingeführten Darstellung $\log(-\log |R_{CvdW}|)$ als Funktion von $\log(k\beta_3)$ bzw. $\log(k\beta_4)$ geplottet. Die drei in den Abbildungen dargestellten Kurven entsprechen den drei Modellpotenzialen (3.10) (gepunktete Linie), (3.11) (gestrichelte Linie) und (3.12) (strichgepunktete Linie).

Abbildung 3.8 zeigt das Energieverhalten für einen kleinen Wert von ρ , nämlich $\rho = 1/10$. In der doppellogarithmischen Darstellung sind die nahezu linearen Energieabhängigkeiten der Reflektivität deutlich erkennbar, einerseits im Niederenergiebereich mit der vorhergesagten Steigung eins und im Hochenergiebereich mit der Steigung $1/3$. Letztere wird auch von den Abschätzungen (3.33) und (3.36) für ein kleines ρ prognostiziert. Um den Übergang in das lineare Verhalten mit der Steigung $1/3$ zu verdeutlichen, ist in der Abbildung 3.8 noch eine Gerade mit dieser Steigung eingezeichnet. Diese Gerade ist nach Gleichung (3.32) berechnet worden, mit den Potenzialparametern, die auch der numerischen Berechnung zugrundegelegt wurden.

Für die drei Modellpotenziale v_1 , v_2 und v_H ist der Längenparameter b beim Parameterwert $\rho = 1/10$ gemäß Gleichung (2.4) und Abbildung 3.7 gleich $b/(\pi\beta_3) = 0.916$, 0.954 bzw. 0.933 . Diese geringen potenzialabhängigen Abweichungen im

Niederenergiebereich machen sich durch eine nur leichte Verschiebung der einzelnen Geraden mit Steigung 1 zueinander bemerkbar. Diese Verschiebung verschwindet erwartungsgemäß für das Hochenergieverhalten, da dort lediglich der asymptotisch geltende van der Waals Potenzialanteil die Reflektivität dominiert und alle drei Modellpotenziale asymptotisch in dieses Potenzialverhalten übergehen. Dies besagt jedoch andererseits, dass für kleine Werte von ρ der Hochenergiebereich nur noch durch die Potenzialstärke β_3 dominiert wird. Die Potenzialstärke β_4 hat dort einen verschwindenden Einfluß. Demgegenüber verringert sie im Niederenergiebereich den Längenparameter b immerhin noch um etwa 7% vom Wert $\pi\beta_3$ für das reine $-1/r^3$ -Potenzial. Für noch kleinere Werte von ρ wird (wie im Abschnitt 3.1.4 eingehend diskutiert) auch dort ihr Einfluß verschwinden und der Längenparameter b nur noch von der Potenzialstärke β_3 abhängen, d.h. $b \sim \pi\beta_3$.

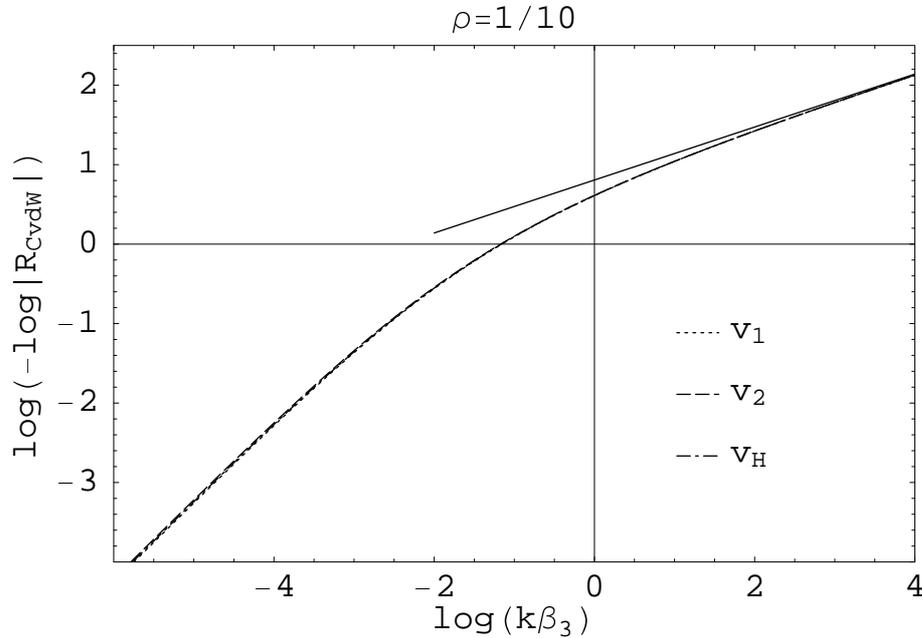


Abbildung 3.8: Reflektivitäten $|R_{CvdW}|$ von Casimir van der Waals Potenzialen für $\rho = 1/10$. Die Ergebnisse für die drei Formfunktionen (3.10), (3.11) und (3.12) sind als (kaum getrennt erkennbare) gepunktete, gestrichelte bzw. strichgepunktete Linie gezeigt. Die durchgezogene Gerade zeigt das für ein $-1/r^3$ -Potenzial nach Gleichung (3.32) erwartete hochenergetische Verhalten.

Abbildung 3.9 zeigt das Energieverhalten der Reflektivität für mittlere Werte von ρ , und zwar für $\rho = 1$, was $\beta_3 = \beta_4$ impliziert. Der Längenparameter b zeigt bei diesem Parameterwert $\rho = 1$ erwartungsgemäß eine größere Abhängigkeit vom verwendeten Modellpotenzial, und zwar $b/\beta_4 (= b/\beta_3) = 0.925, 1.081$ und 1.009 für v_1, v_2 bzw. v_H (vgl. (2.4) und Abbildung 3.7). Diese Potenzialabhängigkeiten verschwinden wieder für den Hochenergiebereich. Allerdings geht das niederenergetische Linearverhalten mit der Steigung 1 sehr viel allmählicher in das hochenergetische Linearverhalten mit der Steigung $1/3$ über. Für den allmählichen Übergang spielt voraussichtlich eine

Rolle, dass beim Übergang in einem Bereich reflektiert wird, bei dem beide Potenzialanteile (Casimir und van der Waals) noch einen gleichwertigen Einfluß haben. Die Steigung sollte damit zwischen $1/2$ und $1/3$ liegen.

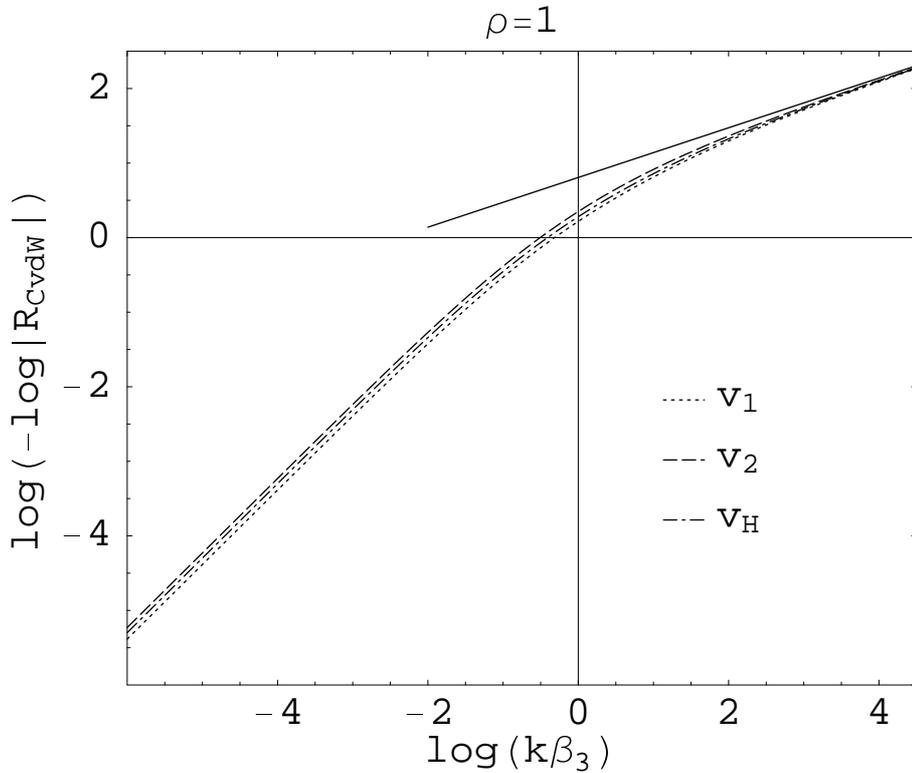


Abbildung 3.9: Reflektivitäten $|R_{CvdW}|$ von Casimir van der Waals Potenzialen für $\rho = 1$. Die drei Kurven entsprechen den drei Formfunktionen (3.10) (gestrichelte Linie), (3.11) (gestrichelte Linie) und (3.12) (strichgepunktete Linie). Die durchgezogene Gerade zeigt das für ein $-1/r^3$ -Potenzial nach Gleichung (3.32) erwartete hochenergetische Verhalten.

Abbildung 3.10 zeigt das Reflexionsverhalten für einen großen Wert des Parameters ρ , und zwar für $\rho = 10$. Im Niederenergiebereich verschwindet die Abhängigkeit der Reflektivität vom Modellpotenzial, da der Längenparameter b die eng beieinander liegenden Werte $b/\beta_4 = 0.999, 1.002$ und 1.010 für v_1, v_2 bzw. v_H annimmt. Über einen begrenzten Energiebereich bei hohen Energien dominiert entsprechend (3.35) der asymptotisch geltende Casimir Potenzialbereich die Reflektivität. Dieser Energiebereich wird durch die Abschätzungen (3.33) und (3.36) eingegrenzt. In Abbildung 3.10 sind die beiden Geraden mit Steigung $1/2$ und $1/3$ für die der numerischen Berechnung zugrundegelegten Parameterwerte eingezeichnet. Verfolgt man die beiden Geraden mit Steigung $1/3$ und $1/2$ in Gedanken hin zu höheren Energien, so legt ihr Schnittpunkt gerade die untere Grenze für das Auftreten des allein vom van der Waals Potenzialbereich abhängigen Reflexionsverhalten fest. Unterhalb dieses Schnittpunktes entspricht das Reflexionsverhalten weitgehend dem des reinen

$-1/r^4$ -Potenzials, insbesondere auch im Niederenergiebereich aufgrund der nahezu alleinigen Abhängigkeit des Längenparameters b von der Potenzialstärke C_4 .

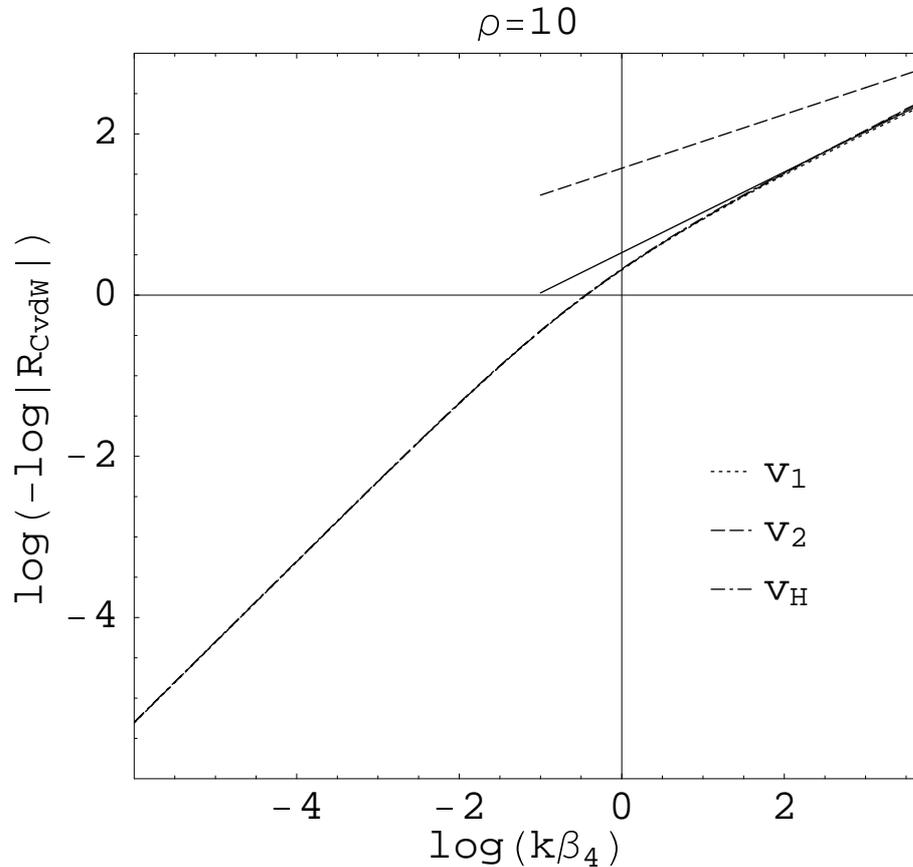


Abbildung 3.10: Reflektivitäten $|R_{CvdW}|$ von Casimir van der Waals Potenzialen für $\rho = 10$. Die Ergebnisse für die drei Formfunktionen (3.10), (3.11) und (3.12) sind als (kaum getrennt erkennbare) gepunktete, gestrichelte bzw. strichgepunktete Linie gezeigt. Die durchgezogene Gerade zeigt das für ein $-1/r^4$ -Potenzial nach Gleichung (3.35) erwartete hochenergetische Verhalten. Die gestrichelte Gerade zeigt das für ein $-1/r^3$ -Potenzial nach Gleichung (3.32) erwartete hochenergetische Verhalten.

3.1.8 Bestimmung der Potenzialparameter

In diesem Abschnitt werden die grundsätzlichen Möglichkeiten zur Bestimmung der Potenzialparameter β_3 und β_4 aus dem Reflektivitätsverlauf erörtert. Um etwaige ρ -abhängige Unterschiede des Reflektivitätsverlaufes im Übergangsbereich zwischen Schwelle und Hochenergie wenigstens visuell auszumachen, sind in der Abbildung 3.11 die Reflektivitätsverhalten zu mehreren Parameterwerten ρ übereinandergelegt, und zwar zwischen einerseits $1/10$ und 10 im Teil (a) und andererseits 1 und 5 im Teil (b). Wie Teil (b) der Abbildung deutlich zeigt, liegen die Kurven zu den Parame-

terwerten zwischen 1 und 5 bis zum Übergang zwischen dem durch (3.35) und dem durch (3.32) genäherten Verhalten fast identisch übereinander. Das belegt bereits die Unmöglichkeit, für Parameterwerte größer als eins aus dem Reflektivitätsverlauf vor diesem Übergang eine Information über den Potenzialparameter β_3 zu erhalten. Der Einfluß des Potenzialparameters β_3 kommt erst beim Übergang in das (3.32)-Verhalten zum Tragen. Ggf. muss aber nicht bis zur von (3.38) vorgegebenen Energie mit den dort äußerst geringen Reflektivitäten gemessen werden, da das "Abknicken" der Reflektivität bereits früher einsetzt und offensichtlich charakteristisch für β_3 ist. Im Teil (b) der Abbildung 3.11 kann beispielsweise mit dem Wert der Reflektivität bei der Energie $\log(k\beta_4) = 3$ der Potenzialparameter β_3 abgeleitet werden. Dies setzt jedoch voraus, dass $\rho < 5$ gilt. Andernfalls liegt bei $\log(k\beta_4) = 3$ noch kein β_3 -abhängiger Unterschied der Reflektivitäten vor. Mit steigendem ρ wird es somit immer unmöglicher, über Messungen von experimentell nachweisbaren Reflektivitäten den Potenzialparameter β_3 zu bestimmen. Die Quantenreflexion findet einfach noch zu weit außerhalb des van der Waals Bereichs statt.

Wenn jedoch einzelne Geraden mit der Steigung 1, 1/3 und/oder 1/2 erkennbar werden, kann über ihre Lage(n) oder Schnittpunkte miteinander zumindest einer (ob nur einer oder gar beide, entscheidet der Parameter ρ) der Potenzialparameter bestimmt werden. Zuerst werden die Schnittpunkte zwischen den Geraden des Nieder- und des Hochenergiebereichs untersucht. Den Schnittpunkt der Geraden mit Steigung eins mit der Geraden mit Steigung 1/3 erhält man, indem (3.30) und (3.32) gleichgesetzt werden. Für sehr kleine ρ gilt gemäß (3.28) weiterhin $b_{v_1} \sim \pi\rho^3/K_0$, was für die skalierte Wellenzahl bedeutet:

$$\frac{k_{\text{Schnitt}}}{K_0} = \left(\frac{B_3}{2\pi}\right)^{3/2} \frac{1}{\rho^3}. \quad (3.40)$$

Mit dem Längenparameter β_3 ausgedrückt, ist das

$$k_{\text{Schnitt}}\beta_3 = \left(\frac{B_3}{2\pi}\right)^{3/2} = 0.213. \quad (3.41)$$

Analog gilt für den Schnittpunkt zur Geraden mit Steigung 1/2, dass (3.30) und (3.35) gleich groß sind. Für sehr große ρ gilt außerdem gemäß (3.29) $b_{v_1} \sim \rho^2/K_0$ und die skalierte Wellenzahl ist für diesen Fall:

$$\frac{k_{\text{Schnitt}}}{K_0} = \left(\frac{B_4}{2}\right)^2 \frac{1}{\rho^2}. \quad (3.42)$$

Mit dem Längenparameter β_4 ausgedrückt, ist das

$$k_{\text{Schnitt}}\beta_4 = \left(\frac{B_4}{2}\right)^2 = 0.718. \quad (3.43)$$

Bei diesen Werten von ρ ist es nicht verwunderlich, dass die Schnittpunkte der Geraden nur vom Parameter β_3 bzw. β_4 abhängen, da bei den obigen Abschätzungen

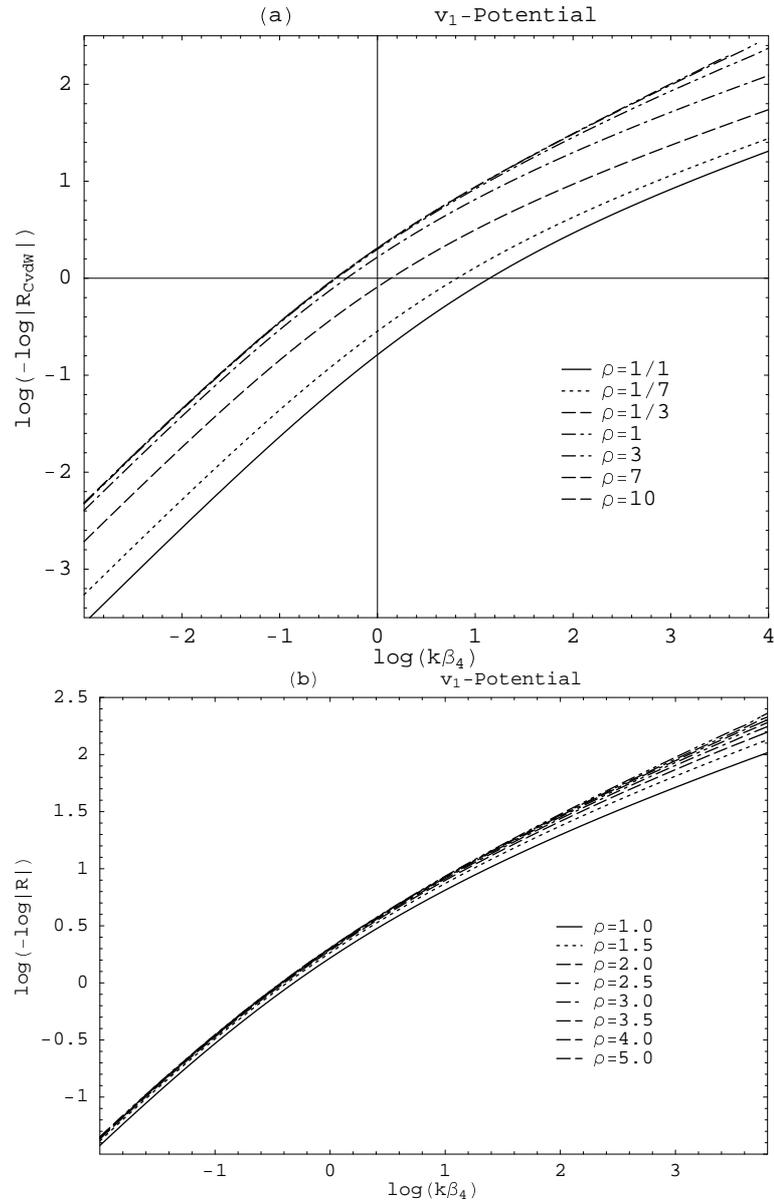


Abbildung 3.11: Reflektivitäten $|R_{CvdW}|$ des Casimir van der Waals Potentials mit der Formfunktion (3.10) für die Werte $\rho = 1/10, 1/7, 1/3, 1, 3, 7, 10$ im Teil (a) und für die Werte $\rho = 1, 1.5, 2, \dots, 4, 5$ im Teil (b) als Funktion von $\log(k\beta_4)$.

in der Näherung (3.30) die Grenzwerte für das reine homogene $-1/r^3$ -Potential bzw. das reine homogene $-1/r^4$ -Potential eingesetzt wurden.

Der Potenzialparameter β_3 kann immer (d.h. unabhängig vom Parameterwert ρ) aus der Lage der Gerade mit der Steigung $1/3$ im Hochenergiebereich wegen der Gültigkeit von (3.32) über $\log(-\log(R)) = \log B_3 + \frac{1}{3} \log k + \frac{1}{3} \log \beta_3$ abgeleitet werden

zu

$$\beta_3 = \exp[-3 \log B_3 - \log k_0] \approx \frac{0.089}{k_0}, \quad (3.44)$$

mit der Definition $k_0 = \exp(\log k_0)$, wobei $\log k_0$ dem Ort in der doppellogarithmischen Darstellung entspricht, bei dem $\log(-\log |R|) = 0$ ist, die Gerade mit Steigung $1/3$ also die Koordinatenachse schneidet. Für große ρ wird im Hochenergiebereich immer noch eine Gerade mit der Steigung $1/2$ erkennbar sein, und der Potenzialparameter β_4 kann aus der Lage dieser Geraden wegen der Gültigkeit von (3.35) gemäß $\log(-\log |R|) = \log B_4 + \frac{1}{2} \log k + \frac{1}{2} \log \beta_4$ zu

$$\beta_4 = \exp[-2 \log B_4 - \log k_0] \approx \frac{0.35}{k_0} \quad (3.45)$$

bestimmt werden.

Wenn diese Gerade mit der Steigung $1/2$ nicht erkennbar ist, kann der Potenzialparameter β_4 für nicht zu kleine ρ wegen der vergleichsweise starken Abhängigkeit des Längenparameters b vom Parameter $\rho = \beta_3/\beta_4$ aus der Lage der Gerade mit Steigung 1 im Niederenergiebereich gemäß $\log(-\log |R|) = \log b + \log k$ (vgl. (2.4)) ermittelt werden. Der Längenparameter ist nämlich

$$b = \frac{1}{k_0}. \quad (3.46)$$

Mit Hilfe von Gleichung (3.25) oder Abbildung 3.7 (Kurve für v_H) wird aus b der Parameter ρ und aus letzterem die Potenzialstärke $\beta_4 = \beta_3/\rho$ abgeleitet. β_3 erhält man über (3.44) aus der Lage der Gerade mit Steigung $1/3$, die bei diesen ρ -Werten kurz nach dem Niederenergiebereich auftauchen sollte (vgl. Abbildung 3.9). Die Abbildung 3.7 ermöglicht auch eine Korrektur des mit Hilfe von (3.25) abgeleiteten Parameters ρ , mit der die für das Potenzial v_1 ermittelten Werte von ρ auf Werte für das realistischere Potenzial v_H der Wasserstoff-Oberfläche-Wechselwirkung korrigiert werden können. Für zu kleine ρ -Werte ist der Längenparameter b jedoch nahezu gleich dem Wert $\pi\beta_3$ und β_4 kann dann nicht mehr auf diese Weise bestimmt werden.

Anders als im Fall kleiner, aber nicht zu kleiner ρ liegt bei großem ρ (bereits ab einem Wert von eins, siehe Abbildung 3.7) eine nahezu konstante Abhängigkeit des Längenparameters b vom Parameter ρ vor. Dies versagt die Bestimmung des Potenzialparameters β_3 aus der Lage der Geraden mit Steigung 1 im Niederenergiebereich. Der Potenzialparameter β_3 ist erst aus der Lage der Geraden mit der Steigung $1/3$ ableitbar, die nach (3.38) allerdings erst bei sehr hohen Energien und äußerst geringen Reflektivitäten in Erscheinung treten sollte. Für $\rho = 10$ erst ab Energien $k\beta_4 \approx 530$, $\log(k\beta_4) \approx 6.3$ und bei Reflektivitäten $|R| \approx 10^{-17}$.

3.1.9 Vergleich mit experimentellem Ergebnis

Nachfolgend werden die zuvor entwickelten Methoden und Abschätzungen an Meßdaten angewandt, die Shimizu in einem in [Shimizu, 2001] veröffentlichten Experiment

gemessen hat. Für die Messung verwendet Shimizu in den metastabilen Zustand angeregte Ne-Atome¹, die aus einer magneto-optischen Falle im freien Fall unter einem sehr flachen Winkel auf eine etwa einen halben Meter tiefer gelegene (1,0,0)-Siliziumoberfläche treffen. Im freien Fall des Gravitationsfeldes nehmen die Atome kinetische Energie auf. Ihre Geschwindigkeitskomponente senkrecht zur Siliziumoberfläche ist wegen des flachen Auftreffwinkels von nur einigen Grad nochmals um nahezu zwei Größenordnungen reduziert. Durch Variieren des Auftreffwinkels stellt Shimizu ihre entsprechende Impulskomponente ein. In seinen Messungen arbeitet er mit Ne-Atomen im Nanokelvin-Bereich. Bei diesen Energien kann er die Geschwindigkeit so im Bereich von einigen Millimetern pro Sekunde variieren. Durch den Effekt der Quantenreflexion reflektiert die Siliziumoberfläche die Ne-Atome spekulär, d.h. unter der Bedingung Einfallswinkel gleich Ausfallswinkel. Die Intensität des durch Quantenreflexion reflektierten Atomstrahls kann damit an einem wohldefinierten Ort im Raum gemessen werden. Ein entsprechender Detektor mit kleiner Blende filtert dort nur die relevanten Ereignisse aus. Die inelastisch gestreuten Atome (Oberflächeneffekte, Anregung von Phononen, etc.) gehorchen grundsätzlich nicht der Bedingung, Einfallswinkel gleich Ausfallswinkel, und werden damit vom Detektor statistisch gesehen unterdrückt. Da die Atome auch in einem Abstand von der Oberfläche reflektiert werden, mitteln sich Unregelmäßigkeiten der Oberfläche aus. Die Reflektivität berechnet sich nach der Intensität des einfallenden zum reflektierten Strahl.

Abbildung 3.12 zeigt die experimentellen Daten für die Reflektivität von Ne-Atomen an der Siliziumoberfläche. Die Reflektivität ist in der doppellogarithmischen Form als Funktion von $\log k$ dargestellt. Am hochenergetischen Ende der Abbildung schmiegen sich die Daten deutlich an eine Gerade der Steigung $1/2$ an. Dies ist das Kennzeichen des Hochenergieverhaltens eines $-1/r^4$ -Potenzials. Ein Fit von Geraden an die letzten sechs bis zehn Datenpunkte liefert Steigungen im Bereich von 0.45 bis 0.55. Mit fest vorgegebener Steigung $1/2$ ergibt der Geraden-Fit für die letzten zehn Datenpunkte:

$$\log(-\log |R|) = 5.2 + \frac{1}{2} \log k. \quad (3.47)$$

Die Gerade (3.47) ist im rechten oberen Abschnitt der Abbildung gezeigt. Gleichung (3.45) bestimmt den Längenparameter β_4 zu $11400a_0$. Dieser Wert stimmt im Rahmen der Meßgenauigkeit mit dem Wert $\beta_4 = 12100a_0$ überein, den Shimizu angibt ($C_4 = 6.7 \times 10^{-56} \text{ J m}^4$).

Die Daten in Abbildung 3.12 reichen nicht zu so hohen Energien, dass der $-1/r^3$ -Anteil des Potenzials seinen Einfluß zeigen kann. Das heißt, dass wir uns im Bereich großer ρ , $\beta_4 \ll \beta_3$, befinden. Dies bestätigt auch eine numerische Lösung der Schrödingergleichung mit dem ermittelten Parameterwert $\beta_4 = 11400a_0$ und einem

¹Der metastabile Zustand wurde ausgehend vom Grundzustand durch optisches Pumpen in einen angeregten Zustand erhalten. Ne-Atome im Grundzustand haben wohl eine zu geringe Polarisierbarkeit und damit eine zu geringe Potenzialstärke C_3 . Quantenreflexion am attraktiven Potenzialschwanz tritt daher erst zu nahe an der Oberfläche auf.

angenommenen Wert von $\rho = 10$. Die Energiekurve der so berechneten Reflektivitäten verläuft gut passend durch die gemessenen Daten. Im Gegensatz dazu zeigt die gleiche Rechnung mit einem Wert von $\rho = 1$ eine Kurve, deren Hochenergieverhalten deutlich von den Meßdaten abweicht. Sicherheitshalber ist mit zwei Modellpotenzialen (3.10) und (3.12) gerechnet worden. Die Abweichung im hochenergetischen Bereich ist jedoch für beide Formfunktionen qualitativ ähnlich ausgeprägt.

Für $\rho = 10$ entspricht das Reflexionsverhalten dem eines reinen $-1/r^4$ -Potenzials. Die Daten der Abbildung 3.12 sind daher nicht geeignet, eine obere Grenze für ρ oder entsprechend eine untere Grenze für $l = \beta_4/\rho$ anzugeben. Dies ist konsistent mit dem von Shimizu angegebenen Wert $l \approx 0$. Bei so hohen Werten von ρ ist der Längenparameter b , der das Verhalten von $|R|$ nahe der Schwelle bestimmt, im wesentlichen gleich β_4 (siehe Abbildung 3.7). Die zugehörige Gerade

$$\log(-\log|R|) = \log(2\beta_4) + \log k \quad (3.48)$$

ist mit dem aus dem Hochenergieverhalten ermittelten Wert $\beta_4 = 12100a_0$ im linken unteren Abschnitt der Abbildung 3.12 dargestellt. Sie paßt im Rahmen der hohen Streuung sehr gut zu den Daten für das Niederenergieverhalten.

3.2 Quantenreflexion an weiteren inhomogenen Potenzialen

Die Überlegungen der vorigen Abschnitte können einfach auf inhomogene Potenziale in Form einer Superposition zweier homogener Potenzialanteile,

$$V_{sum}(r) = -\frac{C_\alpha}{r^\alpha} - \frac{C_{\alpha_1}}{r^{\alpha_1}} = -\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{(\beta_\alpha)^{\alpha-2}}{r^\alpha} + \frac{(\beta_{\alpha_1})^{\alpha_1-2}}{r^{\alpha_1}} \right), \quad (3.49)$$

mit $\alpha_1 > \alpha > 2$, $\beta_\alpha, \beta_{\alpha_1} \geq 0$ übertragen werden. Das Hochenergieverhalten von $V_{sum}(r)$ gibt Gleichung (2.10) wieder. Bei genügend hohen Energien dominiert jedoch - im Gegensatz zum inhomogenen Casimir van der Waals Potenzial - das Potenzial $V(r) = -C_{\alpha_1}/r^{\alpha_1}$, also der für $r \rightarrow 0$ geltende Potenzialanteil mit der höheren Potenz α_1 , die Reflektivität dieses inhomogenen Potenzials. Ob bei mittleren Energien, zwischen diesen hohen Energien und den Schwellenenergien, noch der Potenzialanteil $V(r) = -C_\alpha/r^\alpha$ eine Rolle für das hochenergetische Reflexionsverhalten spielt, hängt wiederum von einem kritischen Parameter

$$\rho_{sum} = \left(\frac{\beta_\alpha}{\beta_{\alpha_1}} \right)^{\frac{(\alpha_1-2)(\alpha-2)}{2(\alpha_1-\alpha)}} \quad (3.50)$$

ab. Diesen Parameter definiert man analog zu (3.7) über die charakteristische Länge

$$l_{sum} = \left[\frac{(\beta_{\alpha_1})^{\alpha_1-2}}{(\beta_\alpha)^{\alpha-2}} \right]^{\frac{1}{\alpha_1-\alpha}}, \quad (3.51)$$

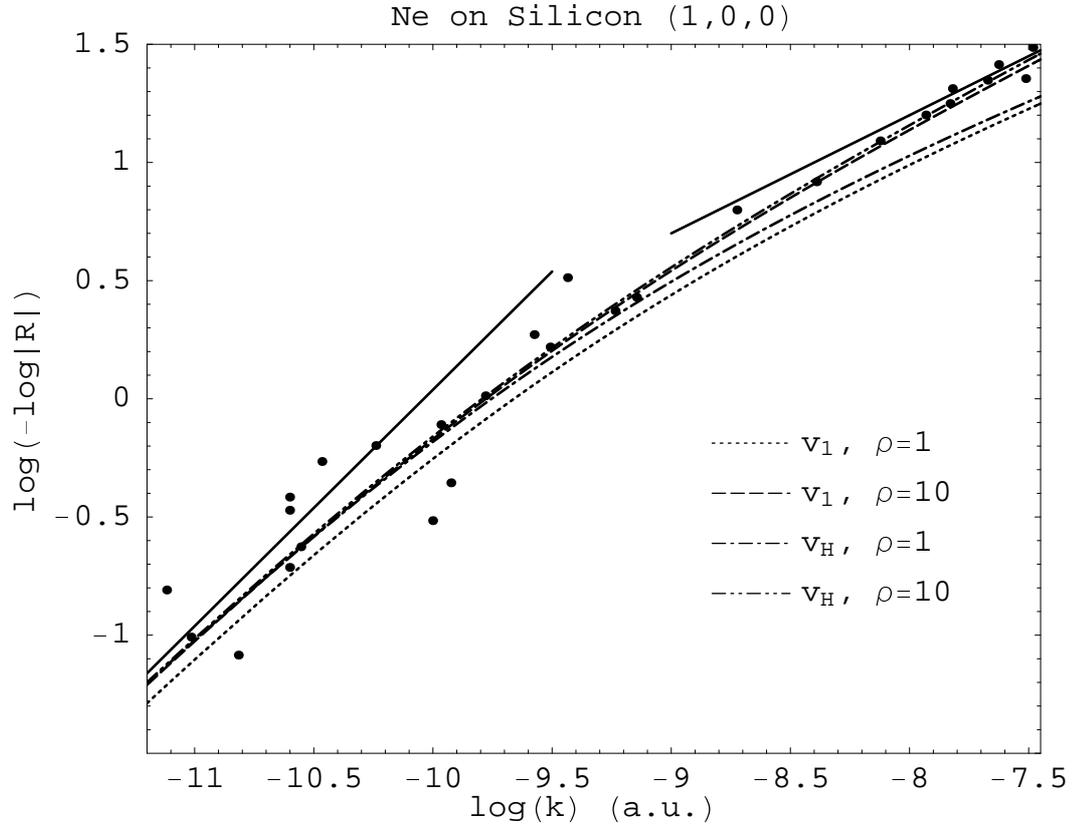


Abbildung 3.12: Reflektivitäten $|R|$, wie sie von Shimizu in [Shimizu, 2001] für die Reflexion von angeregten Neon-Atomen an einer Siliziumoberfläche gemessen wurden (ausgefüllte Quadrate). Die Figur zeigt $\log(-\log|R|)$ als Funktion von $\log k$. Die durchgezogene Gerade im oberen rechten Abschnitt der Abbildung zeigt das Hochenergieverhalten, das für ein homogenes $-1/r^4$ -Potenzial nach Gleichung (3.35) für $\beta_4 = 11400a_0$ erwartet wird. Die durchgezogene Gerade im linken unteren Abschnitt der Abbildung zeigt das Schwellenverhalten nach (2.6) für $b = \beta_4 = 11400a_0$. Die Kurven wurden durch Lösen der Schrödingergleichung mit den Formfunktionen v_1 (3.10) und v_H (3.12) für den obigen Wert von β_4 und für $\rho = 10$ ($\beta_3 = 10\beta_4$) oder $\rho = 1$ ($\beta_3 = \beta_4$) ermittelt.

bei der $-C_\alpha/r^\alpha$ und $-C_{\alpha_1}/r^{\alpha_1}$ gleich groß sind, und über

$$K_{0,sum} = \left[\frac{(\beta_a)^{\alpha_1(\alpha-2)}}{(\beta_{a_1})^{\alpha(\alpha_1-2)}} \right]^{\frac{1}{2(\alpha_1-\alpha)}}, \quad (3.52)$$

den skalierten Potenzialparameter, für den $-\hbar^2 (K_{0,sum})^2 / (2M) = -C_\alpha / (l_{sum})^\alpha = -C_{\alpha_1} / (l_{sum})^{\alpha_1}$ gilt. Im übrigen gelten die Bedingung (3.34) und (3.37) beim Summenpotenzial (3.49) unverändert. Wenn (3.34) erfüllt ist, dominiert das vom $-C_{\alpha_1}/r^{\alpha_1}$ -Potenzialanteil vorgegebene Reflexionsverhalten

$$|R_{sum}| \approx \exp \left[-B_{\alpha_1} (k\beta_{\alpha_1})^{1-2/\alpha_1} \right] = \exp \left[-B_{\alpha_1} \rho_{sum} \left(\frac{k}{K_{0,sum}} \right)^{1-2/\alpha_1} \right] \quad (3.53)$$

die Reflektivität. Wenn die Bedingung (3.37) erfüllt ist, dann dominiert das vom $-C_\alpha/r^\alpha$ -Potentialanteil vorgegebene Reflexionsverhalten

$$|R_{sum}| \approx \exp \left[-B_\alpha (k\beta_\alpha)^{1-2/\alpha} \right] = \exp \left[-B_\alpha \rho_{sum} \left(\frac{k}{K_{0,sum}} \right)^{1-2/\alpha} \right] \quad (3.54)$$

die Reflektivität, solange auch noch (3.31) gilt. Mit den Längenparametern β_α und β_{α_1} ausgedrückt, lauten die Bedingung (3.34) (entsprechend (3.33)):

$$k\beta_{\alpha_1} \gg \left(\frac{\beta_\alpha}{\beta_{\alpha_1}} \right)^{\frac{\alpha_1(\alpha-2)}{2(\alpha_1-\alpha)}} = (\rho_{sum})^{\frac{\alpha_1}{\alpha_1-2}} \quad (3.55)$$

und die Bedingung (3.37) (entsprechend (3.36)):

$$k\beta_\alpha \ll \left(\frac{\beta_\alpha}{\beta_{\alpha_1}} \right)^{\frac{\alpha(\alpha_1-2)}{2(\alpha_1-\alpha)}} = (\rho_{sum})^{\frac{\alpha}{\alpha-2}}. \quad (3.56)$$

Wenn die Bedingung $1/\rho_{sum}^2 \ll k/K_{0,sum} \ll 1$ erfüllt ist, liegt der hochenergetische Übergang zwischen dem durch (3.54) beschriebenen Verhalten und dem durch (3.53) beschriebenen Verhalten bei

$$\frac{k_{Schnitt,sum}}{K_{0,sum}} = \left(\frac{B_\alpha}{B_{\alpha_1}} \right)^{\frac{\alpha_1\alpha}{2(\alpha_1-\alpha)}}. \quad (3.57)$$

Die Reflektivität an diesem Punkt ist ungefähr

$$|R_{Schnitt,sum}| = \exp \left\{ -\rho_{sum} \left[\frac{(B_\alpha)^{\alpha(\alpha_1-2)}}{(B_{\alpha_1})^{\alpha_1(\alpha-2)}} \right]^{\frac{1}{2(\alpha_1-\alpha)}} \right\}. \quad (3.58)$$

Abhängig vom Parameter ρ_{sum} kann auch eine Aussage über das niederenergetische Verhalten getroffen werden. Für den Grenzfall $\rho_{sum} \rightarrow 0$, der $\beta_{\alpha_1} \gg \beta_\alpha$ entspricht, spielt nur der $-C_{\alpha_1}/r^{\alpha_1}$ -Anteil eine Rolle für das Schwellenverhalten, das dann durch

$$|R_{sum}| \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \exp(-2b_{\alpha_1} k\beta_{\alpha_1}) \quad (3.59)$$

wiedergegeben wird. Umgekehrt dominiert für $\rho_{sum} \rightarrow \infty$, was $\beta_\alpha \gg \beta_{\alpha_1}$ entspricht, der $-C_\alpha/r^\alpha$ -Anteil, und es gilt

$$|R_{sum}| \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \exp(-2b_\alpha k\beta_\alpha). \quad (3.60)$$

Die Abbildung 3.13 zeigt für das Summenpotential V_{sum} mit $\alpha = 3$ und $\alpha_1 = 4$ zu verschiedenen Werten des Parameters ρ_{sum} die Reflektivität in der bewährten doppellogarithmischen Darstellung $\log(-\log|R_{sum}|)$ als Funktion von $\log(k\beta_4)$. Nach dem niederenergetischen Bereich mit der Steigung eins knickt der Verlauf für kleine

ρ_{sum} in eine Steigung 1/2 um und behält diese erwartungsgemäß bei, wie mehr oder weniger gut ersichtlich ist. Für große ρ_{sum} knicken die Geraden jedoch im hochenergetischen Bereich stärker in Richtung einer Steigung 1/3 ab. Für noch höhere Energien sollten sie, wie prognostiziert, wieder in eine Steigung 1/2 übergehen. Um diesen Effekt sichtbar zu machen, also insbesondere das erwartete Abknicken von Steigung 1/3 in Steigung 1/2, sind in Teil (a) der Abbildung 3.14 die Steigungen der in Abbildung 3.13 gezeigten Reflektivitätskurven aufgetragen. Hier erkennt man den vorhergesagten Effekt sehr viel besser, dass nämlich für kleine ρ_{sum} die Geradensteigungen monoton auf den Wert 1/2 abfallen, für große ρ_{sum} jedoch ein deutliches Minimum hin zur Steigung 1/3 ausbilden. Um das umgekehrte Verhalten zum Potenzial v_1 (3.10) zu illustrieren, zeigt Teil (b) der Abbildung 3.14 die Steigungen des Reflektivitätsverlaufs für dieses Potenzial zu den gleichen ρ_{sum} -Werten. Erkennbar fallen die Steigungen für kleine ρ_{sum} direkt (ohne Wendepunkt) auf den Wert 1/3 ab, während sie in Richtung höherer ρ_{sum} ein zunehmend ausgeprägteres Plateau beim Steigungswert 1/2 ausbilden (also einen Wendepunkt durchlaufen).

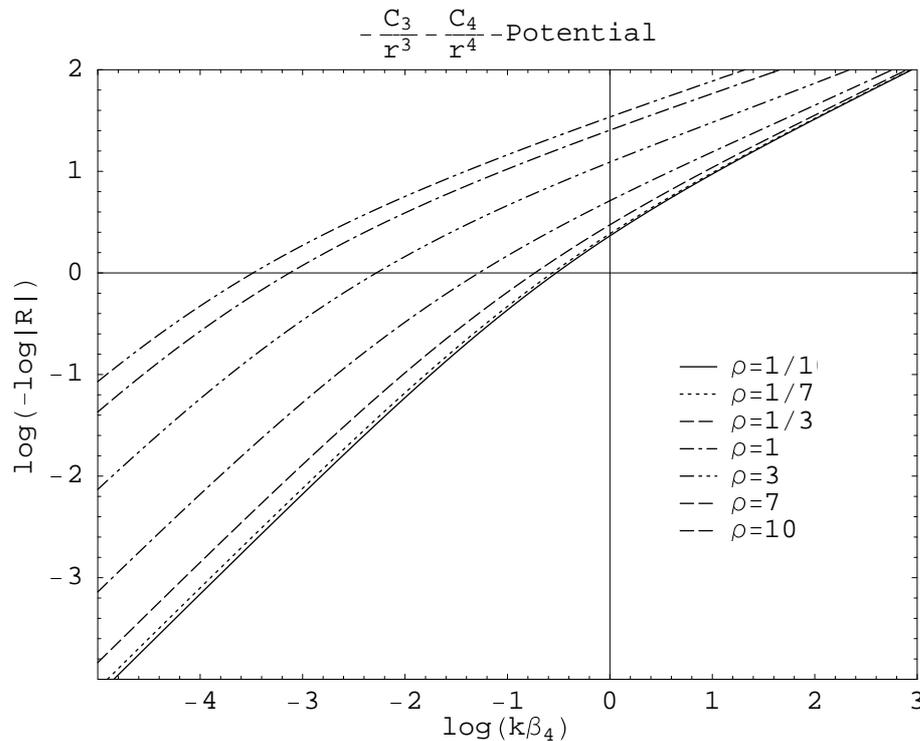


Abbildung 3.13: Reflektivitäten $|R_{sum}|$ des Summenpotenzials $V_{sum}(r) = -C_3/r^3 - C_4/r^4$ für die Werte $\rho_{sum} = 1/10, 1/7, 1/3, 1, 3, 7, 10$ als Funktion von $\log(k\beta_4)$.

Zum Verdeutlichen des entgegengesetzten Verhaltens für $\rho \rightarrow 0$ und $\rho \rightarrow \infty$ einerseits des Casimir van der Waals Potenzials v_1 und andererseits des Summenpotenzials $V_{sum} = -1/x^3 - 1/x^4$ zeigt Abbildung 3.15 diese beiden Potenziale sowie die homogenen Potenziale $V = -1/x^3$ und $V = -1/x^4$. Wie ersichtlich wird, liegen die

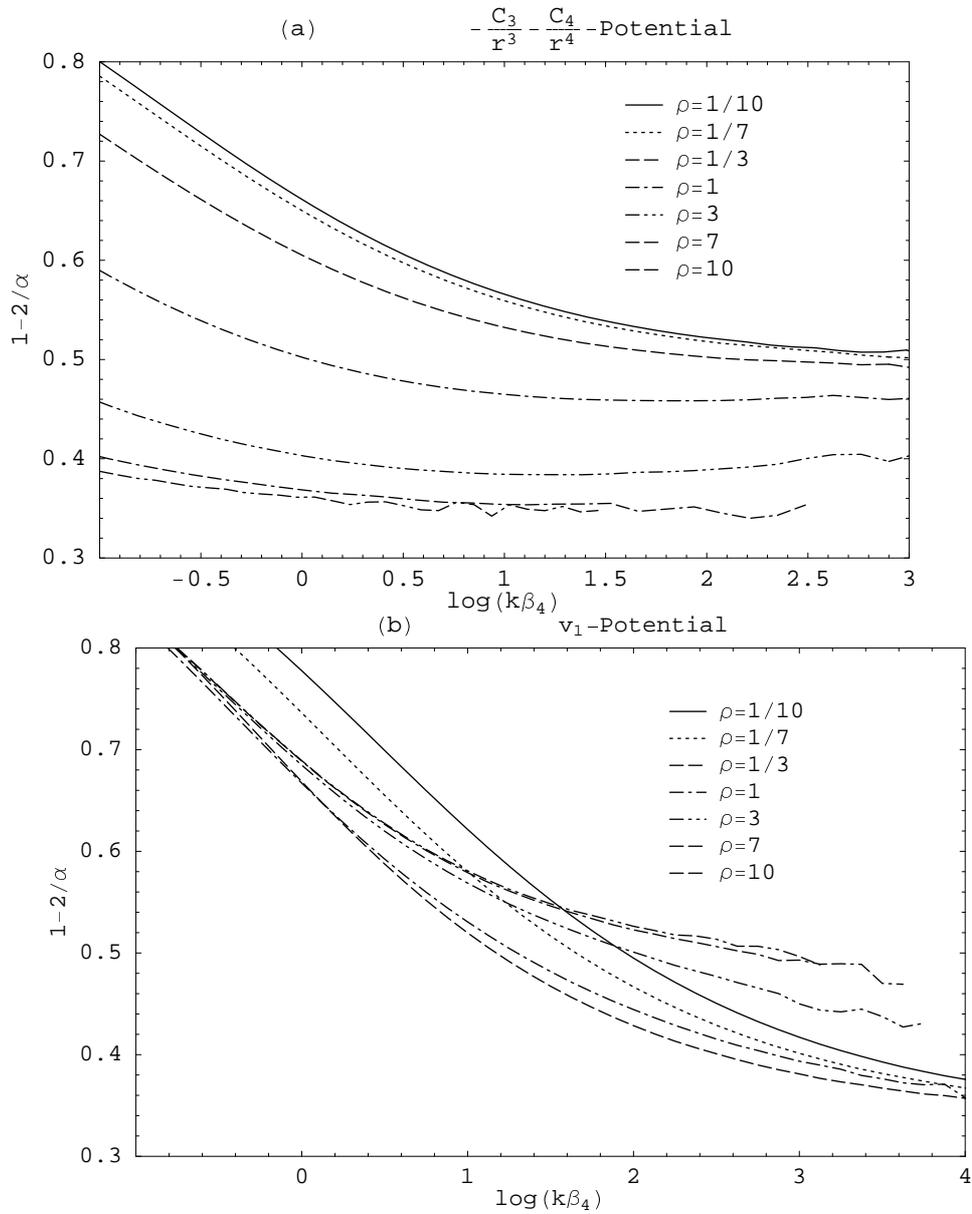


Abbildung 3.14: Steigungen der in Abbildung 3.13 gezeigten Reflektivitätsverläufe $\log(-\log|R_{sum}|)$ des Summenpotenzials $V_{sum}(r) = -C_3/r^3 - C_4/r^4$ für die Werte $\rho_{sum} = 1/10, 1/7, 1/3, 1, 3, 7, 10$ in Teil (a) und von Reflektivitätsverläufen $\log(-\log|R_{CvdW}|)$ des Casimir van der Waals Potenzials v_1 (3.10) für die gleichen ρ -Werte in Teil (b), jeweils als Funktion von $\log(k\beta_4)$.

Werte des Summenpotenzials immer unterhalb der Werte für die beiden homogenen Potenziale, während sie für das Casimir van der Waals Potenzial immer oberhalb dieser Werte liegen. Für $x \rightarrow 0$ schmiegt sich das Summenpotenzial immer stärker an das homogene Potenzial $V = -1/x^4$ und das Casimir van der Waals Potenzial

immer stärker an $V = -1/x^3$ an. Für $x \rightarrow \infty$ ist es genau umgekehrt.

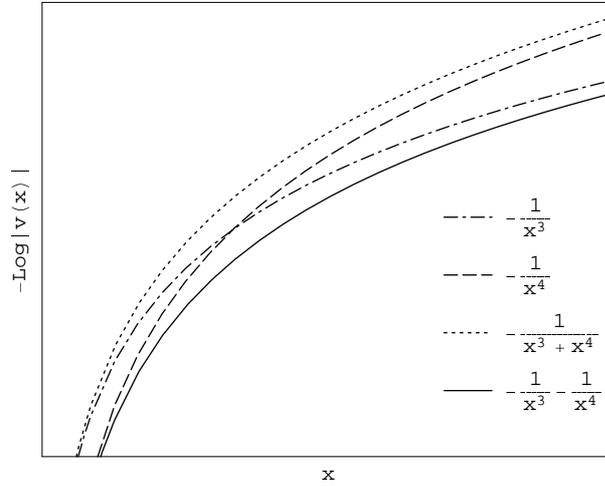


Abbildung 3.15: Vergleich der Potenzialverläufe des Casimir van der Waals Potentials v_1 , des Summenpotenzials $V_{sum} = -1/x^3 - 1/x^4$ und der beiden homogenen Potentiale $V = -1/x^3$ und $V = -1/x^4$.

Für das Schwellenverhalten des Summenpotenzials mit $\alpha = 3$ und $\alpha = 4$, das dem v_1 -Modellpotential des Casimir van der Waals Potential in gewisser Hinsicht ähnlich ist (jedoch mit umgekehrten asymptotischen Grenzverhalten), könnte für mittlere Werte von ρ_{sum} naiv vermutet werden, dass der Übergang ähnlich monoton zwischen den beiden Grenzfällen verläuft. Dass solche Analogien jedoch äußerst bedenklich sind, zeigen Arbeiten von Eltschka *et al.* in [Eltchka, 2000]. Sie haben u.a. das Schwellenverhalten der Reflexion spezieller Typen des inhomogenen Potentialschwanzes $V_{sum}(r)$ untersucht, für die die Bedingung

$$\alpha = m + 1, \quad \alpha_1 = 2m, \quad m > 1 \quad (3.61)$$

gelten. Unter dieser Bedingung besitzt die Schrödingergleichung bei der Energie Null analytische Lösungen in Form von konfluenten hypergeometrischen Funktionen. Der Längenparameter ermittelt sich mit diesen Lösungen zu

$$b_{sum} = \beta_{\alpha_1} (2\nu)^\nu \frac{\Gamma(1-\nu)}{\Gamma(1+\nu)} \left| \frac{\Gamma\left(\frac{1+\nu-i\gamma\nu}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1-\nu-i\gamma\nu}{2}\right)} \right| \sin \left\{ \frac{\pi\nu}{2} - \arg \left[\frac{\Gamma\left(\frac{1+\nu-i\gamma\nu}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1-\nu-i\gamma\nu}{2}\right)} \right] \right\}, \quad (3.62)$$

mit $\gamma = (\beta_\alpha/\beta_{\alpha_1})^{m-1}$ und $\nu = 1/(m-1)$. Die Gleichung (3.30) beschreibt mit diesem Längenparameter b_{sum} das Schwellenverhalten der Reflektivität. Wie Abbildung 3.16 zeigt, in der b_{sum}/β_α für die Werte $\rho_{sum} < 1$ und b_{sum}/β_{α_1} für $\rho > 1$ als Funktion von ρ_{sum} aufgetragen sind, verläuft der Übergang zwischen den beiden Grenzfällen $\rho_{sum} \rightarrow 0$ (entspricht $b_{sum} \rightarrow b_{\alpha_1}$, der Längenparameter für das homogene $-1/r^{\alpha_1}$ -Potential) und $\rho_{sum} \rightarrow \infty$ (entspricht $b_{sum} \rightarrow b_\alpha$, der Längenparameter für das

homogene $-1/r^\alpha$ -Potenzial) allerdings nicht monoton, sondern besitzt insbesondere für den betrachteten Fall $\alpha = 3$ und $\alpha_1 = 4$ bei $\rho_{sum} = 1$, was $\beta_3 = \beta_4$ entspricht, ein Maximum. Weniger ausgeprägte Maxima zeigen die Fälle für größere m . Beidseits der Maxima fallen die b_{sum} -Verläufe in Abhängigkeit von ρ_{sum} jedoch stets monoton auf die gemäß (2.4) vorhergesagten Grenzfälle ab.

Für den speziellen Fall $\alpha = 4$ und $\alpha_1 = 5$ des obigen Summenpotenzials V_{sum} , der nicht die Bedingung (3.61) erfüllt, wird im Anhang C der Längenparameter b_{sum} aus den Lösungen der zugehörigen Schrödingergleichung bei der Energie Null [Polyanin, 1996] bestimmt. Das Ergebnis lautet (von der Struktur ähnlich wie der Längenparameter b_{v_1} für das Casimir van der Waals Potenzial v_1):

$$b_{sum} = \frac{3l/\pi}{(J_{1/3}(\frac{2}{3}\rho))^2 + (Y_{1/3}(\frac{2}{3}\rho))^2}. \quad (3.63)$$

Das Schwellenverhalten dieses Summenpotenzials sollte für den Fall $\rho \rightarrow 0$, was $\beta_4 \ll \beta_5$ entspricht, gemäß (3.49) vom Verhalten des homogenen $-1/r^5$ -Potenzials dominiert werden, und für den Fall $\rho \rightarrow \infty$, der $\beta_5 \ll \beta_4$ entspricht, vom Verhalten des homogenen $-1/r^4$ -Potenzials. Der Längenparameters b_{sum} nimmt dementsprechend im Grenzverhalten für $\rho \rightarrow 0$ den Wert $b_{sum} \stackrel{\rho \rightarrow 0}{\sim} b_5\beta_5 \approx 0.63\beta_5$, wegen

$$b_{sum} \stackrel{\rho \rightarrow 0}{\sim} \frac{3\rho}{\pi K_0} / \frac{(\Gamma(1/3))^2}{\pi^2 (1/3\rho)^{2/3}} = b_5 \frac{(\beta_5)^3}{(\beta_4)^2} \left(\frac{\beta_4}{\beta_5}\right)^2 = b_5\beta_5, \quad (3.64)$$

und für $\rho \rightarrow \infty$ den Wert $b_{sum} \stackrel{\rho \rightarrow \infty}{\sim} b_4\beta_4 = \beta_4$ an (siehe Gleichung (2.4) und Tabelle 2.1), wegen

$$b_{sum} \stackrel{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \frac{3\rho}{\pi K_0} / \frac{3}{\pi\rho} = \rho l = \left(\frac{\beta_4}{\beta_5}\right)^3 \frac{(\beta_5)^3}{(\beta_4)^2} = \beta_4. \quad (3.65)$$

Abbildung 3.16 zeigt ebenfalls für $\rho_{sum} < 1$ den Längenparameter b_{sum}/β_4 und für $\rho_{sum} > 1$ entsprechend b_{sum}/β_5 als Funktion von ρ_{sum} . Der Übergang zwischen den beiden Grenzfällen $\rho_{sum} \rightarrow 0$ ($b_{sum}/\beta_5 \rightarrow 0.63$) und $\rho_{sum} \rightarrow \infty$ ($b_{sum}/\beta_4 \rightarrow 1$) ist wiederum nicht monoton, sondern besitzt bei $\rho_{sum} = 1$, was $\beta_4 = \beta_5$ entspricht, ein Maximum. Zum unmittelbaren Vergleich mit dem Schwellenverhalten des Casimir van der Waals Potenzials v_1 zeigt Abbildung 3.16 auch noch den entsprechenden Längenparameter b_{v_1} für $\rho < 1$ als Verhältnis b_{v_1}/β_3 und für $\rho > 1$ als Verhältnis b_{v_1}/β_4 .

Prinzipiell lassen sich die in dieser Arbeit entwickelten Methoden auch auf beliebige Überlagerungen homogener Potenziale

$$V_{sum}(r) = -\sum_{i=1}^n \frac{C_{\alpha_i}}{r^{\alpha_i}} = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_{i=1}^n \frac{(\beta_{\alpha_i})^{\alpha_i-2}}{r^{\alpha_i}}, \quad (3.66)$$

mit $\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_n$ und $\beta_{\alpha_1}, \beta_{\alpha_2}, \dots, \beta_{\alpha_n} \geq 0$ erweitern. Hier dominiert immer der Term mit der größten Potenz α_n das Hochenergieverhalten, wenn nur eine

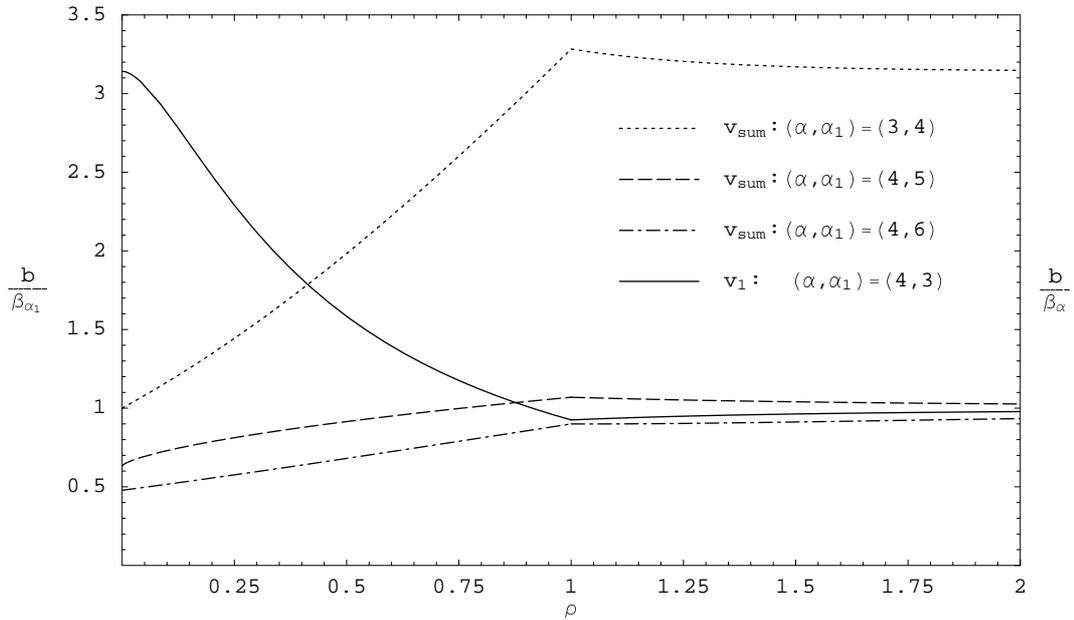


Abbildung 3.16: Längenparameter b , der das schwelennahe Reflektivitätsverhalten des Summenpotenzials gemäß (3.49) mit $\alpha = m + 1$ und $\alpha_1 = 2m$ für $m = 2$ ($(\alpha, \alpha_1) = (3, 4)$) (gepunktete Linie) und $m = 3$ ($(\alpha, \alpha_1) = (4, 6)$) (gestrichelte Linie), des Summenpotenzial $V_{sum} = -(\beta_4)^2/r^4 - (\beta_5)^3/r^5$ (strichgepunktete Linie) und des Casimir van der Waals Potenzial v_1 (durchgezogene Linie) beschreibt. Der linke Abschnitt der Abbildung für $\rho < 1$ zeigt das Verhältnis b/β_{α_1} und der rechte Abschnitt für $\rho > 1$ das Verhältnis b/β_{α} jeweils als Funktion des Parameters ρ .

genügend hohe Energie vorliegt. Von dieser Energie ausgehend können bis zur Schwellenenergie ggf. weitere "Geradenbereiche" ausgemacht werden, und zwar nacheinander mit den Steigungen $1 - 2/\alpha_{n-1}, 1 - 2/\alpha_{n-2}, \dots, 1 - 2/\alpha_1$. Bei der Schwellenenergie liegt wieder die größte Steigung eins vor. Der Verlauf knickt also - in umgekehrter Richtung gesehen - von der Steigung eins auf die flachste Steigung $1 - 2/\alpha_1$ und baut sich dann sukzessive bis zur größten Steigung $1 - 2/\alpha_n$ auf. Ob diese Geradenbereiche tatsächlich existieren, kann wieder mit den Bedingungen (3.34) und (3.37) abgeschätzt werden, wobei hierfür diesmal paarweise Parameter

$$\rho_{i,j} = \left(\frac{\beta_{\alpha_i}}{\beta_{\alpha_j}} \right)^{\frac{(\alpha_i-2)(\alpha_j-2)}{2(\alpha_i-\alpha_j)}} \quad (3.67)$$

sowie entsprechend $(K_0)_{i,j}$ und $l_{i,j}$ gebildet und untersucht werden müssen. Mit den gleichen Überlegungen können auch inhomogene Potenziale der Form

$$V_{inh}(r) = - \left[\frac{r^\alpha}{C_\alpha} + \frac{r^{\alpha_1}}{C_{\alpha_1}} \right]^{-1} = - \frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{r^\alpha}{(\beta_\alpha)^{\alpha-2}} + \frac{r^{\alpha_1}}{(\beta_{\alpha_1})^{\alpha_1-2}} \right]^{-1}, \quad (3.68)$$

mit $\alpha < \alpha_1$ und $\beta_\alpha, \beta_{\alpha_1} \geq 0$, und sogar noch allgemeiner der Form

$$V_{inh}(r) = - \left[\sum_{i=1}^n \frac{r^{\alpha_i}}{C_{\alpha_i}} \right]^{-1} = - \frac{\hbar^2}{2M} \left[\sum_{i=1}^n \frac{r^{\alpha_i}}{(\beta_{\alpha_i})^{\alpha_i-2}} \right]^{-1} \quad (3.69)$$

mit $\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_n$ und $\beta_{\alpha_1}, \beta_{\alpha_2}, \dots, \beta_{\alpha_n} \geq 0$ betrachtet werden. Umgekehrt zu den Summenpotenzialen (3.49) und (3.66) beherrscht immer der Term mit der kleinsten Potenz α_1 das Hochenergieverhalten für eine genügend hohe Energie. Hiervon ausgehend bis zur Schwellenenergie mit der Steigung eins können ggf. nacheinander weitere Geraden mit den Steigungen $1 - 2/\alpha_2, 1 - 2/\alpha_3, \dots, 1 - 2/\alpha_n$ ausgemacht werden. In umgekehrter Richtung gesehen, fällt die Steigung vom Wert eins sukzessive bis zur kleinsten Steigung $1 - 2/\alpha_1$ ab. Wieder sagen die Bedingungen (3.34) und (3.37) voraus, ob solche Geradenbereich existieren. Die paarweisen Parameter $\rho_{i,j}$ hierfür sind die gleichen, wie in (3.67) definiert.

Zum einfachen Abschätzen, ob einzelne Geradenbereiche mit bestimmter Steigung entsprechend den zugehörigen homogenen Potenzialen für das hochenergetische Reflektivitätsverhalten des Gesamtpotenzials sichtbar werden, und in welcher Abfolge diese auftreten, können die im Abschnitt 3.1.3 entwickelten Darstellungen (vgl. Abbildung 3.6) für die Abweichungen des Gesamtpotenzials von den homogenen Potenzialen im Badlandsbereich herangezogen werden. Dabei werden die dort dargestellten "Fehlerbänder" für all diejenigen homogenen Potenziale gezeichnet, für die angenommen wird, dass sie das Gesamtpotenzial in bestimmten Abstandsbereichen annähern. Für die obigen Summenpotenziale (3.66) und "inversen" Summenpotenziale (3.69) sind dies genau die homogenen Anteile dieser Potenziale. Befinden sich in der genannten Darstellung dann in bestimmten Koordinatenabschnitten jeweils einzelne Fehlerbänder allein unterhalb der Koordinatenachse, dann sollte die Reflektivität bei den diesen Abschnitten entsprechenden Energien vom jeweiligen Verhalten des zu diesem Fehlerband zugehörigen homogenen Potenzials geprägt sein. Die Abfolge solcher Fehlerbänder unterhalb der Koordinatenachse in Richtung kleinerer Abstände bzw. höherer Energien legt die Abfolge der beobachtbaren Geradensteigungen fest.

Kapitel 4

Versuch einer Messung des Potenzialverlaufes durch Messung der Reflektivität

In diesem Kapitel wird eine mögliche Methode zum Messen wenigstens eines Abschnittes des Potenzialverlaufes eines beliebigen Potentials besprochen. Voraussetzung für eine solche Messung ist prinzipiell, dass die Energien genügend hoch gewählt und die damit einhergehenden geringen Reflektivitäten gemessen werden können. Bei genügend hohen Energien ist die Badlandsfunktion nämlich so stark lokalisiert, dass lediglich ein sehr schmaler Bereich des Potenzialverlaufes die Reflektivität beeinflusst (vgl. Abschnitt 3.1.3). In diesem Bereich beherrscht das Hochenergieverhalten die Reflektivität

$$R(k) \approx \exp\left(-B_\alpha (k\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}\right). \quad (4.1)$$

Diese Darstellung der Reflektivität setzt voraus, dass das Gesamtpotenzial in diesem Bereich von einem homogenen Potenzialanteil

$$V_\alpha(r) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{(\beta_\alpha)^{\alpha-2}}{r^\alpha} \quad (4.2)$$

mit $\alpha > 2$ dominiert wird. Viele realistische Potentiale können allerdings prinzipiell als eine Summe homogener Potenzialanteile ausgedrückt werden. Dann können - wie wir im vorigen Kapitel gesehen haben - abhängig von den Potenzialparametern β_α solche Bereiche existieren, in denen (4.1) gut ist. Die genäherte Reflektivität (4.1) gibt die tatsächliche Reflektivität in den Bereichen unzureichend wieder, in dem wenigstens ein weiterer Potenzialanteil der Potenzialentwicklung nicht vernachlässigbar ist

Wo (4.1) eine gute Näherung ist, entsteht bei den zugehörigen Energien der Hauptanteil zur Reflexion um den Ort, an dem die asymptotische Gesamtenergie des Teilchens gleich dem Betrag dieses homogenen Potenzialanteils ist. Durch Messung von

$R(k_0)$ wird dann also im wesentlichen der Wert des Potentials am Ort

$$r_0 = \frac{(\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}}{(k_0)^{2/\alpha}} \quad (4.3)$$

ermittelt. Die lokale Potenzialpotenz $\alpha(r_0)$ des bei r_0 dominierenden homogenen Potenzialanteils erhält man gemäß (4.1) durch numerisches Ableiten der gemessenen Funktion $\log(-\log|R(k)|)$ nach $\log k$ am Ort r_0 zu

$$\alpha(r_0) = \frac{2}{1 - \frac{\partial[\log(-\log|R(k_0)|)]}{\partial \log k}}. \quad (4.4)$$

Die lokale Potenzialstärke $\beta_\alpha(r_0)$ des Potentials beträgt nach (4.1) am Ort r_0 :

$$\beta_\alpha(r_0) = -\frac{1}{k} \left(\frac{\log R(k_0)}{B_\alpha} \right)^{\frac{\alpha}{\alpha-2}}. \quad (4.5)$$

Den Wert B_α erhält man aus der tabellierbaren oder numerisch berechenbaren Funktion $B(\alpha)$ nach Gleichung (2.11). Damit mißt man also bei einem fest vorgegebenen k_0 des Teilchens den Wert des Potentials

$$V(r_0) = -\frac{\hbar^2(k_0)^2}{2M}, \quad (4.6)$$

bei

$$r_0 = \frac{|\log R(k_0)|}{k_0 B_\alpha(r_0)}.$$

Durch Variieren der Energie kann nunmehr das Potenzial über einen weiten Bereich abgetastet werden, solange die Hochenergiebedingung erfüllt ist und an jedem Ort r_0 im wesentlichen nur ein homogener Potenzialanteil dominiert. In den Übergangsbereichen zwischen Schwellenbereich und Hochenergiebereich sowie zwischen den zwei Bereichen je eines dominierenden Potenzialanteils versagt diese Methode jedoch. Zu ganz hohen Energien hin werden immer Oberflächeneffekte zu berücksichtigen sein, da r_0 zu klein wird.

Die Abbildung 4.1 zeigt den relativen Fehler von abgetastetem zu tatsächlichem Potenzial für die beiden homogenen Potentiale $\alpha = 3$ und $\alpha = 4$ und das Wasserstoffpotenzial v_H mit dem realistischen noch "kritischen" Parameterwert $\rho = 1.77$, bei dem keiner der beiden Potenzialanteile den Gesamtverlauf im betrachteten Energieintervall dominiert. Wie nicht anders zu erwarten, ist der Fehler für kleine Energien und damit für große Abstände des Reflexionsbereichs vom Ursprung groß, da noch das Schwellenverhalten bzw. der Übergang vom Schwellenverhalten in das Hochenergieverhalten mit seinem breiten Reflexionsbereich die Reflektivität bestimmt. Zu noch größeren Energien hin wird der Fehler immer kleiner, da dort das Hochenergieverhalten beginnt und der Reflexionsbereich genügend lokalisiert ist. Insgesamt

wäre es für eine präzisere Messung des Potenzialverlaufs wünschenswert, mehr Information über das genaue Reflektivitätsverhalten einerseits im Übergangsbereich zwischen dem nieder- und dem hochenergetischen Verhalten und andererseits in den Übergangsbereichen zu haben, in denen zwei oder mehrere Potenzialanteile gleich relevant sind.

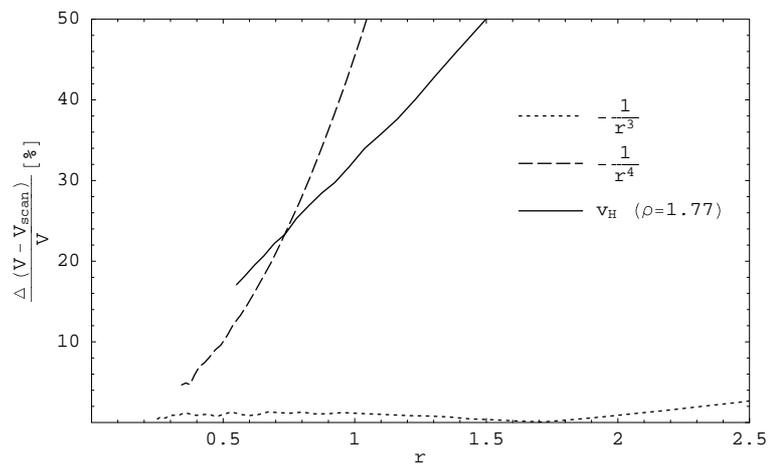


Abbildung 4.1: Relativer Fehler zwischen einerseits den beiden homogenen Potenzialen $\alpha = 3$ (gepunktete Linie) und $\alpha = 4$ (gestrichelte Linie) sowie dem Potenzial v_H nach Gleichung (3.12) (durchgezogene Linie), mit dem Parameterwert $\rho = 1.77$, und andererseits dem zugehörigen Potenzial, das mit der in Kapitel 4 erläuterten Methode abgetastet wurde.

Kapitel 5

Zusammenfassung

In der Arbeit sind grundlegende Methoden diskutiert worden, aus dem Nieder- und dem Hochenergieverhalten der Reflektivität eines attraktiven Potenzialschwanzes Information über das zugrundeliegende Potenzial abzuleiten. Hierzu wurden Näherungen vorgestellt, die das Nieder- und das Hochenergieverhalten für die untersuchten Potenzialtypen gut wiedergeben. Die gefundenen Näherungen gaben Anlaß zu einer speziellen doppellogarithmischen Darstellung der Reflektivität als Funktion des Logarithmus der Energie. In dieser Darstellung hinterlassen die behandelten Potenzialtypen ihren charakteristischen Fingerabdruck in Form von Geraden mit potenzialspezifischen Steigungen. Die Lagen der Geraden lassen oftmals unmittelbare Rückschlüsse auf die Potenzialparameter zu. Wann dies der Fall ist, wurde eingehend diskutiert. Unser besonderes Augenmerk richtete sich dabei auf das zur Zeit in der Forschung wieder verstärkt untersuchte Casimir van der Waals Potenzial. Hierzu konnte gezeigt werden, dass der in Gleichung (3.7) definierte Parameter ρ die entscheidende Größe ist. Er bestimmt, wie wichtig der $-1/r^3$ -Anteil und der $-1/r^4$ -Anteil des Casimir van der Waals Potenzials für die Quantenreflexion ist. Für $\rho \ll 1$ sind die Reflektivitäten im wesentlichen gleich denen eines homogenen $-1/r^3$ -Potenzials. Sie bleiben über den gesamten Energiebereich von irgendwelchen Retardierungseffekten unbeeinflusst. Der Reflektivitätsverlauf liefert nur den Potenzialparameter C_3 . Für große Werte von ρ ist die Reflektivität über einen großen, aber endlichen Energiebereich ($1 \ll k\beta_4 \ll \rho^2$) nicht von der eines homogenen $-1/r^4$ -Potenzials unterscheidbar. In diesem Energiebereich kann nur eine Aussage über den Potenzialparameter C_4 getroffen werden. Erst bei noch größeren Energien (wenn $k\beta_4 \sim 5\rho^2$) macht sich der $-1/r^3$ -Anteil für die Reflektivität bemerkbar und C_3 ermittelt sich aus dem Reflektivitätsverlauf bei diesen Energien. Die Reflektivitäten sind dort jedoch äußerst gering ($R < \exp(-4\rho)$) und eine zuverlässige Messung erscheint fragwürdig. Nur bei Parameterwerten $\rho \lesssim 1$ können für vernünftig meßbare Reflektivitäten Aussagen sowohl über C_3 als auch C_4 getroffen werden.

Ob Retardierungseffekte aus der gemessenen Reflektivität erkennbar sind, wird am einfachsten aus der doppellogarithmischen Darstellung ersichtlich. Die Retardierung gibt sich durch eine Gerade der Steigung $1/2$ zu erkennen, die an die stets

vorliegende Steigung eins für den Niederenergiebereich anschließt. Retardierung ist nicht zu beobachten, wenn das niederenergetische Verhalten mit Steigung eins direkt in eine Gerade mit Steigung $1/3$ übergeht. Die Lagen der Geraden mit Steigung $1/2$ und $1/3$ liefern unmittelbar die Potenzialparameter C_4 bzw. C_3 . Bei zu kleinem ρ ($\rho \ll 1$) oder $\rho > 1$ liefert die Lage der Gerade mit Steigung eins nur den Potenzialparameter, der auch durch die sich unmittelbar an diese Gerade anschließende Gerade mit Steigung $1/3$ bzw. $1/2$ bestimmt wird. Ansonsten kann C_3 aus der Lage der Gerade mit Steigung $1/3$ und dann C_4 aus der Lage der Gerade mit Steigung eins ermittelt werden. Allerdings spielen in diesem Bereich auch das jeweilige zugrundegelegte Modellpotenzial, das den Übergang zwischen den asymptotischen $-1/r^3$ - und $-1/r^4$ -Anteilen beschreibt, eine nicht zu vernachlässigende Rolle.

Die Potenzialparameter C_3 und C_4 definieren den kurzreichweitigen bzw. den langreichweitigen Anteil des Casimir van der Waals Potentials. Sie hängen entscheidend von der Dipolpolarisierbarkeit des Projektilatoms ab. Diese Polarisierbarkeit wird durch die Elektronenstruktur des Atoms festgelegt. Ähnliche Elektronenkonfigurationen sollten daher zu ähnlichen C_3 und C_4 führen. Dies bestätigt auch die Tabelle 1.1, in der die Werte für die Alkalimetall-Atome von Li bis Cs mit je zwei Valenzelektronen bis auf einen Faktor 2.5 übereinstimmen. Der kritische Parameter ρ ist durch $\rho = \left(\sqrt{2M}\right) / (C_3/\sqrt{C_4})$ gegeben. Für vorgegebene Werte von C_3 und C_4 sinkt ρ zu kleineren Massen und steigt zu höheren Massen. Der Retardierungseffekt, der sich im Reflektivitätsverhalten eines homogenen $-C_4/r^4$ -Potentials äußert, wird daher eher bei schwereren Projektilen sichtbar. Leider ist die Reflektivität, bei der sich der Retardierungseffekt dann zeigt, bereits ziemlich gering.

Große Werte von ρ sind in realistischen Systemen allgegenwärtig. Dies zeigen Tabelle 1.1 und die obigen Meßdaten für Neon-Atome, die an einer Siliziumoberfläche reflektiert wurden. Das heißt, das die Quantenreflexion von Atomen fast generell von den Retardierungseffekten im Casimir van der Waals Potential dominiert wird. Bei großen ρ tritt aber auch der Übergang der Reflexion am retardierten hin zum nicht-retardierten Potenzialanteil erst bei extrem kleinen Reflektivitäten auf. Information über den nicht-retardierten Anteil bzw. über den Verlauf des Modellpotentials erhält man daher besser mit leichteren Projektilen, für kleine oder mittlere ρ . Kleinere Werte für ρ erzielt man auch durch Erniedrigen der dielektrischen Konstante bei entsprechender Wahl der Reflexionsoberfläche. Niedrige dielektrische Konstanten vermindern die Stärke des gesamten Potentials und damit auch das Verhältnis $C_3/\sqrt{C_4}$. Bei zu geringen Potenzialstärken kann es jedoch passieren, dass der attraktive Teil des Potentials insgesamt zu schwach ist, um vor der Oberfläche einen klassischen Bereich aufzubauen. β_3 und β_4 sollten daher nicht in die Gegend von nur wenigen Bohr'schen Radien abfallen.

Anhang A

Berechnung des Längenparameters b_{v_1} für das Modellpotenzial v_1

Die der dimensionslosen Schrödingergleichung (3.8) mit dem Potenzial v_1 und bei der Energie $k = 0$ entsprechende Differentialgleichung als Funktion der dimensionslosen Koordinate x ,

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \rho^2 \frac{1}{x^3 + x^4} \psi(x) \stackrel{n=4}{=} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \rho^2 \frac{(1+x)^{n-4}}{x^n} \psi(x) = 0, \quad (\text{A.1})$$

kann gemäß [Polyanin, 1996] mit der Variabeltransformation

$$x = \frac{z}{1-z}, \quad \psi(x) = (x+1)y(z) \quad (\text{A.2})$$

in die Form

$$\frac{d^2y(z)}{dz^2} + \frac{\rho^2}{z^3}y(z) = 0 \quad (\text{A.3})$$

gebracht werden, mit $\rho = \beta_3/\beta_4$. Diese Gleichung besitzt nach [Polyanin, 1996] die analytischen Lösungen:

$$y(r) = A_{0,1}\sqrt{z}J_{-1}\left(-\frac{2\rho}{\sqrt{z}}\right) + B_{0,1}\sqrt{z}Y_{-1}\left(-\frac{2\rho}{\sqrt{z}}\right), \quad (\text{A.4})$$

wobei J_1 und Y_1 gewöhnliche Besselfunktionen erster Ordnung sind. Mit den Rücktransformationen

$$z = \frac{x}{x+1}, \quad y(z) = \frac{\psi(x)}{x+1} \quad (\text{A.5})$$

ergibt sich unter Ausnutzung der Eigenschaften der Besselfunktionen $J_{-1}(z) = -J_1(z)$ und $J_1(-z) = -J_1(z)$:

$$\psi(x) = A_{0,1}\sqrt{x(x+1)}J_1\left(2\rho\sqrt{1+\frac{1}{x}}\right) + B_{0,1}\sqrt{x(x+1)}Y_1\left(2\rho\sqrt{1+\frac{1}{x}}\right). \quad (\text{A.6})$$

Es werden nunmehr zwei Linearkombinationen dieser Funktion mit dem gewünschten asymptotischen Verhalten $\psi_0(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 1$ und $\psi_1(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} x$ gesucht. Hierzu wird $\psi(x)$ für $x \rightarrow \infty$ entwickelt:

$$\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \left(x + \frac{1}{2}\right) \left[A_{0,1} \left(J_1(2\rho) + J_1'(2\rho) \frac{\rho}{x} \right) + B_{0,1} \left(Y_1(2\rho) + Y_1'(2\rho) \frac{\rho}{x} \right) \right]. \quad (\text{A.7})$$

Dies ist nach Ordnungen 1 und x geordnet:

$$\begin{aligned} \psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} & \left[\frac{A_{0,1}}{2} J_1(2\rho) + \frac{B_{0,1}}{2} Y_1(2\rho) + \rho A_{0,1} J_1'(2\rho) + \rho B_{0,1} Y_1'(2\rho) \right] \\ & + [A_{0,1} J_1(2\rho) + B_{0,1} Y_1(2\rho)] x. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Für $\psi_0(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 1$ werden die Koeffizienten A_0 und B_0 der Funktion $\psi(x)$ so bestimmt, dass der Faktor vor x verschwindet, d.h.

$$A_0 J_1(2\rho) + B_0 Y_1(2\rho) = 0, \quad (\text{A.9})$$

und der konstante Term gleich eins wird, d.h.

$$A_0 J_1'(2\rho) + B_0 Y_1'(2\rho) = 1/\rho. \quad (\text{A.10})$$

Mit der Wronski-Determinante $J_\nu(z) Y_\nu'(z) - J_\nu'(z) Y_\nu(z) = 2/(\pi z)$ ergibt sich

$$A_0 = -\pi Y_1(2\rho) \quad (\text{A.11})$$

und

$$B_0 = +\pi J_1(2\rho). \quad (\text{A.12})$$

Auf ähnliche Weise werden für $\psi_1(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} r$ die Koeffizienten A_1 und B_1 der Funktion $\psi(x)$ so bestimmt, dass der Faktor vor x gleich eins wird:

$$A_1 J_1(2\rho) + B_1 Y_1(2\rho) = 1, \quad (\text{A.13})$$

und der konstante Term verschwindet:

$$A_1 J_1'(2\rho) + B_1 Y_1'(2\rho) = -\frac{1}{2\rho}. \quad (\text{A.14})$$

Hieraus ergibt sich unter Anwendung der Wronski-Determinante:

$$A_1 = +\pi \left(\frac{1}{2} Y_1(2\rho) + \rho Y_1'(2\rho) \right) \quad (\text{A.15})$$

und

$$B_1 = -\pi \left(\frac{1}{2} J_1(2\rho) + \rho J_1'(2\rho) \right). \quad (\text{A.16})$$

Die allgemeine Lösung mit den Koeffizienten $A_{0,1}$ und $B_{0,1}$ (A.6) kann für $x \rightarrow 0$ mit der asymptotischen Form der Besselfunktionen $J_\nu(z)$ und $Y_\nu(z)$ für $z \rightarrow \infty$ wie folgt dargestellt werden [Abramowitz, 1972]:

$$\psi(x) \stackrel{x \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{\sqrt{\pi\rho}} x^{3/4} (x+1)^{1/4} \left[A_{0,1} \cos\left(2\rho\sqrt{1+\frac{1}{x}} - \frac{3\pi}{4}\right) + B_{0,1} \sin\left(2\rho\sqrt{1+\frac{1}{x}} - \frac{3\pi}{4}\right) \right]. \quad (\text{A.17})$$

Dies läßt sich mit $A \cos(z) + B \sin(z) = \sqrt{A^2 + B^2} \cos(z - \arctan(B/A))$ umformen in:

$$\psi(x) \stackrel{x \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{\sqrt{\pi\rho}} x^{3/4} (x+1)^{1/4} \sqrt{(A_{0,1})^2 + (B_{0,1})^2} \cos\left[2\rho\sqrt{1+\frac{1}{x}} - \frac{3\pi}{4} - \arctan\frac{B_{0,1}}{A_{0,1}}\right]. \quad (\text{A.18})$$

Die WKB-Lösung bei der Energie Null für das Potenzial v_1 ist wegen

$$\frac{1}{\hbar} \int_r^\infty p_0(r) dr = \int_x^\infty K_0 l \sqrt{\frac{1}{x^3 + x^4}} dx = 2\rho\sqrt{1+\frac{1}{x}} - 2\rho \quad (\text{A.19})$$

als Funktion der dimensionslosen Variablen $x = r/l$ gleich

$$\psi_{0,1}^{\text{WKB}}(x) = D_{0,1} \frac{1}{\sqrt{\hbar K_0}} x^{3/4} (x+1)^{1/4} \cos\left(2\rho\sqrt{1+\frac{1}{x}} - 2\rho - \frac{\phi_{0,1}}{2}\right). \quad (\text{A.20})$$

Ein Vergleich von (A.18) mit (A.20) liefert die zu bestimmenden Amplituden der WKB-Lösung

$$D_{0,1} = \sqrt{\frac{\hbar}{\pi l}} \sqrt{(A_{0,1})^2 + (B_{0,1})^2} \quad (\text{A.21})$$

und die entsprechenden Phasen

$$\frac{\phi_{0,1}}{2} = \frac{3}{4}\pi - 2\rho + \arctan\frac{B_{0,1}}{A_{0,1}}. \quad (\text{A.22})$$

Der analog zu (1.38) definierte dimensionslose Längenparameter b'_{v_1} berechnet sich allgemein als Funktion der Parameter A_0, B_0, A_1 und B_1 unter Berücksichtigung von $\sin[\arctan(x) - \arctan(y)] = (x-y)/\sqrt{(1+x^2)(1+y^2)}$ zu:

$$b'_{v_1} = \frac{A_1 B_0 - A_0 B_1}{(A_0)^2 + (B_0)^2}. \quad (\text{A.23})$$

Setzt man die in (A.11), (A.12), (A.15) und (A.16) angegebenen Ausdrücke für A_0, B_0, A_1 und B_1 in (A.23) ein und verwendet die Wronski-Determinante $J_1(2\rho)Y_1'(2\rho) - J_1'(2\rho)Y_1(2\rho) = \rho/\pi$, dann ergibt sich für den dimensionslosen Längenparameter:

$$b'_{v_1} = \frac{1/\pi}{(J_1(2\rho))^2 + (Y_1(2\rho))^2} \quad (\text{A.24})$$

Multiplikation mit der charakteristischen Länge $l = (\beta_4)^2 / \beta_3$ liefert den Längenparameter:

$$b_{v_1} = \frac{l/\pi}{(J_1(2\rho))^2 + (Y_1(2\rho))^2}. \quad (\text{A.25})$$

Anhang B

Berechnung der Reflektivität eines homogenen Potentials gemäß

$$R \sim -i \exp \left(\frac{2i}{\hbar} \int^{r_t} p(r) dr \right)$$

Der klassische Impuls für das homogene Potenzial

$$V_\alpha(r) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{(\beta_\alpha)^{\alpha-2}}{r^\alpha} \quad (\text{B.1})$$

lautet

$$p(r) = \hbar \sqrt{k^2 + \frac{(\beta_\alpha)^{\alpha-2}}{r^\alpha}}. \quad (\text{B.2})$$

Der komplexe Umkehrpunkt des Teilchens mit der Energie $E = \hbar^2 k^2 / (2M)$ für das homogene Potenzial (B.1) mit dem kleinsten positiven Imaginärteil ist:

$$r_t = (-1)^{1/\alpha} \frac{(\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}}{k^{2/\alpha}} = \left(\cos \left(\frac{\pi}{\alpha} \right) + i \sin \left(\frac{\pi}{\alpha} \right) \right) \frac{(\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}}{k^{2/\alpha}}. \quad (\text{B.3})$$

Da bei der Berechnung der genäherten Reflektivität gemäß

$$|R_\alpha| \sim \exp \left(\frac{2i}{\hbar} \int^{r_t} p(r) dr \right) \quad (\text{B.4})$$

lediglich die Integration entlang der imaginären Achse einen reellen Beitrag zur Reflektivität liefert, wird der Integrationsweg wie folgt parametrisiert:

$$r(\xi) = \left(\cos \left(\frac{\pi}{\alpha} \right) + \xi i \sin \left(\frac{\pi}{\alpha} \right) \right) \frac{(\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}}{k^{2/\alpha}} \quad (\text{B.5})$$

mit $\xi = 0 \rightarrow 1$. Wegen $dr = i \sin(\pi/\alpha) (\beta_\alpha)^{1-2/\alpha} k^{-2/\alpha} d\xi$ lautet der Exponent in (B.4) dann:

$$\begin{aligned} & -2 \int_0^1 \sqrt{k^2 + (\beta_\alpha)^{\alpha-2} \left[\left(\cos\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) + \xi i \sin\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) \right) \frac{(\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}}{k^{2/\alpha}} \right]^{-\alpha}} \sin\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) \frac{(\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}}{k^{2/\alpha}} d\xi \\ & = -2 \sin\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) (k\beta_\alpha)^{1-2/\alpha} \int_0^1 \sqrt{1 + \left(\cos\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) + \xi i \sin\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) \right)^{-\alpha}} d\xi. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Die Reflektivität ist damit:

$$|R_\alpha| \sim \exp\left(-B_\alpha (k\beta_\alpha)^{1-2/\alpha}\right), \quad (\text{B.7})$$

mit

$$B_\alpha = 2 \sin\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) \operatorname{Re} \left[\int_0^1 \sqrt{1 + \left(\cos\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) + \xi i \sin\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) \right)^{-\alpha}} d\xi \right]. \quad (\text{B.8})$$

Anhang C

Berechnung des Längenparameters b_{sum} für das Summenpotenzial

$$V_{sum}(r) = -C_4/r^4 - C_5/r^5$$

Die der dimensionslosen Schrödingergleichung (3.8) mit dem speziellen Summenpotenzial $V_{sum}(x) = -1/x^4 - 1/x^5$ als Funktion der dimensionslosen Koordinate x und bei der Energie $k = 0$ entsprechende Differentialgleichung

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \rho^2 \left(\frac{1}{x^4} + \frac{1}{x^5} \right) \psi(x) \stackrel{n=5}{=} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \rho^2 \frac{(1+x)^{n-4}}{x^n} \psi(x) = 0 \quad (C.1)$$

kann gemäß [Polyanin, 1996] mit der Variabeltransformation

$$x = \frac{z}{1-z}, \quad \psi(x) = (x+1)y(z) \quad (C.2)$$

in die Form

$$\frac{d^2y(z)}{dz^2} + \frac{\rho^2}{z^5}y(z) = 0 \quad (C.3)$$

gebracht werden, mit $\rho = (\beta_4/\beta_5)^3$. Diese Gleichung besitzt nach [Polyanin, 1996] die analytischen Lösungen:

$$y(r) = \tilde{A}_{0,1}\sqrt{z}J_{-1/3}\left(-\frac{2\rho}{3\sqrt{z^3}}\right) + \tilde{B}_{0,1}\sqrt{z}Y_{-1/3}\left(-\frac{2\rho}{3\sqrt{z^3}}\right), \quad (C.4)$$

wobei $J_{-1/3}$ und $Y_{-1/3}$ gewöhnliche Besselfunktionen der Ordnung $-1/3$ sind. Um nachfolgend Besselfunktionen mit reellen Werten für $0 < \rho < \infty$ im Ausdruck für den Längenparameter b_{sum} zu erhalten, werden anstelle von $J_{-1/3}(-f(z))$ und $Y_{-1/3}(-f(z))$ die Besselfunktionen $J_{1/3}(f(z))$ und $Y_{1/3}(f(z))$ herangezogen und etwaige komplexe Umrechnungsfaktoren zwischen diesen Funktionen in neuen Koeffizienten $A_{0,1}$ und $B_{0,1}$ berücksichtigt. Mit den Rücktransformationen

$$z = \frac{x}{x+1}, \quad y(z) = \frac{\psi(x)}{x+1} \quad (C.5)$$

ergibt sich dann:

$$\psi(x) = A_{0,1} \sqrt{x(x+1)} J_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \sqrt{\left(1 + \frac{1}{x}\right)^3} \right) + B_{0,1} \sqrt{x(x+1)} Y_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \sqrt{\left(1 + \frac{1}{x}\right)^3} \right). \quad (\text{C.6})$$

Es werden nunmehr zwei Linearkombinationen dieser Funktion mit dem gewünschten asymptotischen Verhalten $\psi_0(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 1$ und $\psi_1(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} x$ gesucht. Hierzu wird $\psi(x)$ für $x \rightarrow \infty$ entwickelt:

$$\begin{aligned} \psi(x) &\overset{x \rightarrow \infty}{\sim} \left(x + \frac{1}{2} \right) \\ &\left[A_{0,1} \left(J_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) + J'_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) \frac{\rho}{x} \right) + B_{0,1} \left(Y_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) + Y'_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) \frac{\rho}{x} \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

Dies ist nach Ordnungen 1 und x geordnet:

$$\begin{aligned} \psi(x) &\overset{x \rightarrow \infty}{\sim} \left[\frac{A_{0,1}}{2} J_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) + \frac{B_{0,1}}{2} Y_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) + \rho A_{0,1} J'_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) + \rho B_{0,1} Y'_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) \right] \\ &+ \left[A_{0,1} J_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) + B_{0,1} Y_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) \right] x. \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

Für $\psi_0(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 1$ werden die Koeffizienten A_0 und B_0 der Funktion $\psi(x)$ so bestimmt, dass der Faktor vor x verschwindet:

$$A_0 J_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) + B_0 Y_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) = 0, \quad (\text{C.9})$$

und der konstante Term gleich eins wird:

$$A_0 J'_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) + B_0 Y'_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) = 1/\rho. \quad (\text{C.10})$$

Mit der Wronski-Determinante $J_\nu(z) Y'_\nu(z) - J'_\nu(z) Y_\nu(z) = 2/(\pi z)$ ergibt sich

$$A_0 = -\frac{\pi}{3} Y_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) \quad (\text{C.11})$$

und

$$B_0 = +\frac{\pi}{3} J_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right). \quad (\text{C.12})$$

Auf ähnliche Weise werden für $\psi_1(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} r$ die Koeffizienten A_1 und B_1 der Funktion $\psi(x)$ so bestimmt, dass der Faktor vor x gleich eins wird:

$$A_1 J_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) + B_1 Y_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) = 1, \quad (\text{C.13})$$

und der konstante Term verschwindet:

$$A_1 J'_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) + B_1 Y'_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) = -\frac{1}{2\rho}. \quad (\text{C.14})$$

Hieraus ergibt sich unter Anwendung der Wronski-Determinante:

$$A_1 = +\frac{\pi}{3} \left[\frac{1}{2} Y_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) + \rho Y'_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) \right] \quad (\text{C.15})$$

und

$$B_1 = -\frac{\pi}{3} \left[\frac{1}{2} J_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) + \rho J'_{1/3} \left(\frac{2}{3} \rho \right) \right]. \quad (\text{C.16})$$

Die allgemeine Lösung mit den Koeffizienten $A_{0,1}$ und $B_{0,1}$ (C.6) kann für $x \rightarrow 0$ mit der asymptotischen Form der Besselfunktionen $J_\nu(z)$ und $Y_\nu(z)$ für $z \rightarrow \infty$ wie folgt dargestellt werden [Abramowitz, 1972]:

$$\begin{aligned} \psi(x) \stackrel{x \rightarrow 0}{\sim} & \sqrt{\frac{3}{\pi\rho}} x^{5/4} (x+1)^{-1/4} \\ & \left[A_{0,1} \cos \left(\frac{2}{3} \rho \sqrt{\left(1 + \frac{1}{x}\right)^3 - \frac{5}{12}\pi} \right) + B_{0,1} \sin \left(\frac{2}{3} \rho \sqrt{\left(1 + \frac{1}{x}\right)^3 - \frac{5}{12}\pi} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.17})$$

Dies läßt sich mit $A \cos(z) + B \sin(z) = \sqrt{A^2 + B^2} \cos(z - \arctan(B/A))$ umformen in:

$$\psi(x) \stackrel{x \rightarrow 0}{\sim} \sqrt{\frac{3}{\pi\rho}} x^{5/4} (x+1)^{-1/4} \sqrt{(A_{0,1})^2 + (B_{0,1})^2} \cos \left[\frac{2}{3} \rho \sqrt{\left(1 + \frac{1}{x}\right)^3 - \frac{5}{12}\pi} - \arctan \frac{B_{0,1}}{A_{0,1}} \right]. \quad (\text{C.18})$$

Die WKB-Lösung bei der Energie Null für das Potenzial $V_{sum}(x) = -1/x^4 - 1/x^5$ ist wegen

$$\frac{1}{\hbar} \int_r^\infty p_0(r) dr = \int_x^\infty K_0 l \sqrt{\frac{1}{x^4} + \frac{1}{x^5}} dx = \frac{2}{3} \rho \sqrt{\left(1 + \frac{1}{x}\right)^3} - \frac{2}{3} \rho \quad (\text{C.19})$$

als Funktion der dimensionslosen Variablen $x = r/l$ gleich

$$\psi_{0,1}^{\text{WKB}}(x) = D_{0,1} \frac{1}{\sqrt{\hbar K_0}} x^{5/4} (x+1)^{-1/4} \cos \left(\frac{2}{3} \rho \sqrt{\left(1 + \frac{1}{x}\right)^3} - \frac{2}{3} \rho - \frac{\phi_{0,1}}{2} \right). \quad (\text{C.20})$$

Ein Vergleich von (C.18) mit (C.20) liefert die Amplituden

$$D_{0,1} = \sqrt{\frac{3\hbar}{\pi l}} \sqrt{(A_{0,1})^2 + (B_{0,1})^2} \quad (\text{C.21})$$

und die Phasen

$$\frac{\phi_{0,1}}{2} = \frac{5}{12}\pi - \frac{2}{3}\rho + \arctan \frac{B_{0,1}}{A_{0,1}}. \quad (\text{C.22})$$

Der analog zu (1.38) definierte dimensionslose Längenparameter b'_{sum} berechnet sich allgemein als Funktion der Parameter A_0, B_0, A_1 und B_1 unter Berücksichtigung von $\sin [\arctan (x) - \arctan (y)] = (x - y) / \sqrt{(1 + x^2)(1 + y^2)}$ zu:

$$b'_{sum} = \frac{A_1 B_0 - A_0 B_1}{(A_0)^2 + (B_0)^2}. \quad (\text{C.23})$$

Setzt man die in (C.11), (C.12), (C.15) und (C.16) angegebenen Ausdrücke für A_0, B_0, A_1 und B_1 in (C.23) ein und verwendet die Wronski-Determinante $J_1(2/3\rho)Y_1'(2/3\rho) - J_1'(2/3\rho)Y_1(2/3\rho) = 3\rho/\pi$, dann ergibt sich für den dimensionslosen Längenparameter:

$$b'_{sum} = \frac{3/\pi}{(J_{1/3}(\frac{2}{3}\rho))^2 + (Y_{1/3}(\frac{2}{3}\rho))^2}. \quad (\text{C.24})$$

Multiplikation mit der charakteristischen Länge $l = (\beta_5)^3 / (\beta_4)^2$ liefert den Längenparameter:

$$b_{sum} = \frac{3l/\pi}{(J_{1/3}(\frac{2}{3}\rho))^2 + (Y_{1/3}(\frac{2}{3}\rho))^2}. \quad (\text{C.25})$$

Literaturverzeichnis

- [Abramowitz, 1972] M. Abramowitz und I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1972).
- [Berkhout, 1989] J. J. Berkhout, O. J. Luiten, I. D. Setija, T. W. Hijmans, T. Mizusaki und J. T. M. Walraven, *Vanishing sticking probabilities and enhanced capillary flow of spin-polarized hydrogen*, Phys. Rev. Lett. **63**, 1689 (1989).
- [Berry, 1972] M. V. Berry und K. E. Mount, *Semiclassical approximations in wave mechanics*, Rep. Prog. Phys. **35**, 315 (1972).
- [Böheim, 1982] J. Böheim, W. Brenig und J. Stutzki, *On the low energy limit of reflection and sticking coefficients in atom surface scattering*, Z. Phys. B Condensed Matter **48**, 43 (1982).
- [Böheim, 1984] J. Böheim, *Sticking and accommodation of He on metal surfaces at low temperatures*, Surface Sci. **148**, 463 (1984).
- [Bordag, 2001] M. Bordag, U. Mohideen und V. M. Mostepanenko, *New developments in the Casimir effect*, Phys. Rep. **353**, 1 (2001).
- [Brenig, 1992] W. Brenig und R. Russ, *On the low energy limit of sticking coefficients*, Surface Sci. **278**, 397 (1992).
- [Casimir, 1948] H. B. G. Casimir und D. Polder, *The influence of retardation on the London-van der Waals forces*, Phys. Rev. **73**, 360 (1948).
- [Côté, 1997a] R. Côté, H. Friedrich und J. Trost, *Reflection above potential steps*, Phys. Rev. A **56**, 1781 (1997).
- [Côté, 1997b] R. Côté, B. Segev und M. G. Raizen, *Retardation effects on quantum reflection from an evanescent-wave atomic mirror*, Phys. Rev. A **56**, R3350 (1997).

- [Derevianko, 1999] A. Derevianko, W. R. Johnson, M. S. Safronova und J. F. Babb, *High-precision calculations of dispersion coefficients, static dipole polarizabilities, and atom-wall interaction constants for alkali-metal atoms*, Phys. Rev. Lett. **82**, 3589 (1999).
- [Doyle, 1991] J. M. Doyle, J. C. Sandberg, I. A. Yu, C. L. Cesar, D. Kleppner und T. J. Greytak, *Hydrogen in the submillikelvin regime: Sticking probability on superfluid ^4He* , Phys. Rev. Lett. **67**, 603 (1991).
- [Dzyaloshinskii, 1961] I. E. Dzyaloshinskii, E. M. Lifshitz und L. P. Pitaevskii, *The general theory of van der Waals forces*, Adv. Phys. **10**, 165 (1961).
- [Eltschka, 2000] C. Eltschka, M. J. Moritz und H. Friedrich, *Near-threshold quantization and scattering for deep potentials with attractive tails*, J. Phys. B **33**, 4033 (2000).
- [Eltschka, 2001] C. Eltschka, H. Friedrich und M. J. Moritz, *Comment on "Break-down of Bohr's correspondence principle"* Phys. Rev. Lett. **86**, 2693 (2001).
- [Farina, 2002] C. Farina, F. C. Santos und A. C. Tort, *On the force between an electrically polarizable atom and a magnetically polarizable one*, J. Phys. A: Math. Gen. **35**, 2477 (2002).
- [Friedrich, 1998] H. Friedrich, *Theoretical Atomic Physics*, 2. Auflage (Springer-Verlag, Berlin 1998).
- [Friedrich, 2002] H. Friedrich, G. Jacoby und C. G. Meister, *Quantum reflection by Casimir-van der Waals potential tails*, Phys. Rev. A **65**, 032902 (2002).
- [Holstein, 2001] B. Holstein, *The van der Waals interaction*, Am. J. Phys. **69**, 441 (2001).
- [Kharchenko, 1997] P. Kharchenko, J. F. Babb und A. Dalgarno, *Long-range interactions of sodium atoms*, Phys. Rev. A **55**, 3566 (1997).
- [Landau, 1979] L. D. Landau und E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik, Band III: Quantenmechanik*, Berlin, 1979; ISBN 3-05-500067-6.
- [Lennard, 1932] L. E. Lennard-Jones, Trans. Faraday Soc. **28**, 333 (1932).
- [Maitra, 1996] N. T. Maitra und E. J. Heller, *Semiclassical perturbation approach to quantum reflection*, Phys. Rev. A **54**, 4763 (1996).

- [Marani, 2000] R. Marani, L. Cagnet, V. Savalli, N. Westbrook, C. I. Westbrook und A. Aspect, *Using atomic interference to probe atom-surface interactions*, Phys. Rev. A **61**, 053402 (2000).
- [Marinescu, 1997] M. Marinescu, A. Dalgarno und J. F. Babb, *Retarded long-range potentials for the alkali-metal atoms and a perfectly conducting wall*, Phys. Rev. A **55**, 1530 (1997).
- [Mody, 2001] A. Mody, H. Haggerty, J. M. Doyle und E. J. Heller, *No-sticking effect and quantum reflection in ultracold collisions*, Phys. Rev. B **64**, 085418 (2001).
- [Moritz, 2001] M. J. Moritz, Doktorarbeit, *Tunneln und Reflexion langer Wellen*, Technische Universität München, 2001; URL <http://tumb1.biblio.tu-muenchen.de/publ/diss/ph/2001/moritz>.
- [Nayak, 1983] V. U. Nayak, D. O. Edwards und N. Masuhara, *Scattering of ^4He atoms grazing the liquid- ^4He surface*, Phys. Rev. Lett. **50**, 990 (1983).
- [Polyanin, 1996] A. D. Polyanin und V. F. Zaitsev, *Handbuch der Linearen Differentialgleichungen* (Spektrum Akad. Verlag, Heidelberg, 1996), Seite 46.
- [Prokovskii, 1958a] V. L. Prokovskii, S. K. Savvinykh und F. K. Ulinich, *Reflection from a barrier in the quasi-classical approximation*, Sov. Phys. JETP **34**, 879 (1958).
- [Prokovskii, 1958b] V. L. Prokovskii, F. K. Ulinich und S. K. Savvinykh, *Reflection from a barrier in the quasi-classical approximation*, Sov. Phys. JETP **34**, 1119 (1958).
- [Shimizu, 2001] F. Shimizu, *Specular reflection of very slow metastable neon atoms from a solid surface*, Phys. Rev. Lett. **86**, 987 (2001).
- [Shimizu, 2002] F. Shimizu, *Reflection-type hologram for atoms*, Phys. Rev. Lett. **88**, 123201 (2002).
- [Trost, 1998a] J. Trost, C. Eltschka und H. Friedrich, *Quantization in molecular potentials*, J. Phys B **31**, 361 (1998).
- [Trost, 1998b] J. Trost, C. Eltschka und H. Friedrich, *Comment on: "Quantization of the highest levels in a molecular potential"*, Europhys. Lett. **43**, 230 (1998).
- [Vidali, 1991] G. Vidali, G. Ihm, H.-Y. Kim und M. W. Cole, *Potentials of physical adsorption*, Surf. Sci. Rep. **12**, 133 (1991).

- [Yan, 1997] Z.-C. Yan, A. Dalgarno und J. F. Babb, *Long-range interactions of lithium atoms*, Phys. Rev. A **55**, 2882 (1997).
- [Yu, 1993] I. A. Yu, J. M. Doyle, J. C. Sandberg, C. L. Cesar, D. Kleppner und T. J. Greytak, *Evidence for universal quantum reflection of hydrogen from liquid ^4He* , Phys. Rev. Lett. **71**, 1589 (1993).

Danksagung

Zuallererst gilt mein großer Dank meinem Doktorvater, Herr Prof. Dr. H. Friedrich, der mir diese berufsbegleitende Doktorarbeit ermöglichte und größtes Verständnis für immer wieder aufgetretene Verzögerungen durch die Doppelbelastung zeigte. Mit seinem ständigen Interesse am Fortgang der Arbeit, seiner ausgezeichneten Betreuung und seiner über die gesamte Länge andauernden aktiven Mitarbeit trug er einen Hauptteil zum Gelingen bei.

Auch bei den anderen Mitgliedern seiner Arbeitsgruppe möchte ich mich bedanken. So unterstützte mich Herr Dr. C. Eltschka vor allem am Anfang der Arbeit, die numerischen Probleme bei der Lösung der Schrödingergleichung in den Griff zu bekommen. Herr C. Meister stand immer für Diskussionen zur Verfügung, überprüfte Rechnungen und half bei allen sonstigen im Umfeld der Arbeit aufgetretenen Problemen.

Meinen Partnern, Herrn F. R. von Samson-Himmelstjerna, Herrn M. Turi, Herrn Dr. W. Lippich und Herrn Dr. O. Niederkofler, möchte ich für ihr Verständnis und ihre Geduld danken. Sie motivierten mich, die Arbeit trotz der damit verbundenen zeitlichen Einschränkungen neben meinem partnerschaftlichen Beruf zu Ende zu führen.

In den heißesten Stunden kurz vor Ende des Zusammenschreibens halfen mir auch Herr Dr. M. Freund und Herr Dr. T. Stammberger geduldig, die unvermeidlich auftretenden Probleme mit der Schreibsoftware und der Formattierung dieser Arbeit zu lösen. Auch ihnen gilt mein Dank

Zu guter Letzt sei allen gedankt, die mich in der ein oder anderen Weise bei der Durchführung dieses Projektes unterstützten.