

Technische Universität München

Fakultät für Physik

Quantenreflexion von Wellenpaketen an atomaren Potentialen

Alexander Jurisch

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

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

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

Die Dissertation wurde am 8. 9. 2005 bei der
Technischen Universität München eingereicht und
durch die Fakultät für Physik am 6. 10. 2005 angenommen.

Quantenreflexion von Wellenpaketen an atomaren Potentialen

Alexander Jurisch

»Haben Sie jemals die Atom-Theorie entdeckt oder von ihr gehört?« befragte er mich.

»Nein«, antwortete ich.

Er beugte seinen Mund vertraulich an mein Ohr.

»Würde es Sie in Erstaunen versetzen, wenn Sie erführen«, sagte er dunkel, »daß die Atom-Theorie in dieser Gemeinde am Werk ist?«

»Das würde es allerdings.«

»Sie richtet namenlosen Schaden an«, fuhr er fort. »Die Hälfte der Bevölkerung ist davon befallen, und es ist schlimmer als die schwarzen Blattern.«

Ich hielt es für besser, *irgend* etwas zu sagen.

»Wäre es nicht ratsam«, sagte ich, »das Gesundheitsamt mit diesem Fall zu betrauen, oder die Lehrer, oder finden Sie, es geht eher die Haushaltungsvorstände an?«

»Das Wesentliche, der springende Punkt und das, worauf es ankommt«, sagte der Sergeant, »ist das Landratsamt.«

Er ging weiter und sah besorgt und zerstreut drein, so, als sei das, was er in seinem Kopf bewegte, auf besonders verzwickte Weise unerfreulich.

»Die Atom-Theorie«, versetzte ich, »ist mir überhaupt nicht klar.«...

»Haben Sie denn als junger Bursch nie die Atomphysik studiert?« fragte der Sergeant und betrachtete mich forschend und erstaunt.

»Nein«, antwortete ich.

(Flann O'Brien: *Der dritte Polizist.*)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
I	Theorie	9
2	Semiklassische Theorie	11
2.1	Die WKB-Theorie	11
2.2	Der Gültigkeitsbereich der WKB-Theorie	13
2.3	Klassischer und anticlassischer Limes der Schrödingergleichung	14
3	Theorie der Atom-Oberflächen-Wechselwirkung	17
3.1	Der Casimir-Effekt – die Kraft aus dem Nichts	18
3.2	Herleitung der Atom-Oberflächen-Wechselwirkung	19
3.2.1	Die statische Dipol-Dipol-Wechselwirkung	20
3.2.2	Die universelle Selbstwechselwirkung des Photonenfeldes	21
3.2.3	Die Kopplung zwischen Atom und Photonenfeld	22
3.2.4	Asymptotische Limiten der Energieverschiebung	23
3.2.5	Erweiterung auf Dielektrika	25
4	Theorie der Quantenreflexion	27
4.1	Die einfache Potentialstufe	28
4.2	Konstruktion der quantenreflektierten Welle	29
4.2.1	Universelles Schwellenverhalten der Quantenreflexion	31
4.3	Kinematische Deutung der Phase	33

II	Die Kinematik der Quantenreflexion	35
5	Einfache atomare Potentiale	37
5.1	Verhalten von Wellenpaketen	37
5.1.1	Phase, Orts- und Zeitverschiebung	38
5.1.2	Hochenergieverhalten	41
5.2	Klassische Orts- und Zeitverschiebung	43
6	Atom-Oberflächen-Potentiale	47
6.1	Skalierung	47
6.2	Verhalten von Wellenpaketen	49
6.2.1	Modellpotentiale	50
6.2.2	Phase, Orts- und Zeitverschiebung	53
6.2.3	Klassische Orts- und Zeitverschiebung	57
6.2.4	Schwellenlänge und mittlere Streulänge	60
7	Metastabiler Wasserstoff	65
7.1	Eigenschaften von Wasserstoff	66
7.2	Konstruktion des Potentials	67
7.3	Das Verhalten der Quantenreflexion	68
8	Ein realistisches Modell für eine Quantenreflexionsfalle	73
8.1	Realistische Modellierung der Falle	74
8.2	Beschreibung der Zeitentwicklung	76
8.2.1	Quantenmechanische Zeitentwicklung	76
8.2.2	Semiklassisches Modell der Zeitentwicklung	79
8.2.3	Quantenmechanische Asymptotik für große Zeiten	81
8.3	Das Verhalten der zeitabhängigen Dichte	84
8.3.1	Die zeitabhängige Ortsraumdichte	84
8.3.2	Die überlebende zeitabhängige Dichte	87
8.4	Ein Beispiel – Natrium	90
9	Nachwort	93
A	Analytisches Schwellenverhalten	95
A.1	Schwellenverhalten für $\alpha = 3$	95
A.2	Schwellenverhalten für $\alpha = 4$	96
A.3	Schwellenverhalten für $\alpha > 4$	98
A.4	Schwellenverhalten des Shimizupotentials	99

Kapitel 1

Einleitung

Die Betrachtung von Bewegungen in der Quantenmechanik führt auf zwei wesentliche Quantenphänomene, die in der klassischen Mechanik über kein Analogon verfügen, das Quantentunneln und die Quantenreflexion. Das Quantentunneln beschreibt den klassisch nicht möglichen Durchgang eines Teilchens durch eine Potentialbarriere, während die Quantenreflexion die Umkehr der Bewegungsrichtung in einem Raumbereich beschreibt, in dem nach den Gesetzen und Vorstellungen der klassischen Mechanik ein Reflexionsvorgang nicht stattfinden darf. Bereits kurz nach der theoretischen Formulierung der Quantenmechanik konnte Gamow [19, 20, 21] im Jahre 1928 den α -Zerfall von Atomkernen mit Hilfe des Quantentunnelns erklären. Das Phänomen der Quantenreflexion blieb hingegen lange unbeachtet. Mit der Entwicklung der Quantenoptik, die es heute ermöglicht, einzelne Atome gezielt zu manipulieren, insbesondere aber mit der bereits im Jahre 1924 vorausgesagten, experimentellen Realisierung von Bose-Einstein-Kondensaten im Jahre 1995 erlebt die lange vernachlässigte, atomphysikalische Forschung eine Erneuerung. Eines ihrer Teilgebiete ist die Quantenreflexion.

Die Quantenreflexion untersucht das Verhalten eines Atoms – oder eines atomaren Wellenpaketes – in einem von anderen Atomen erzeugten, attraktiven Potentialschwanz der Form

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

Potentiale dieser Form treten bei direkter, interatomarer Wechselwirkung sowie bei, im Hinblick auf die Quantenoptik besonders interessanten, Wechselwirkungen zwischen einem Atom und einer Oberfläche auf. Sie beschreiben

das asymptotische Verhalten des Potentialverlaufs für große Entfernungen zwischen einem Atom und dem das Potential erzeugenden Wechselwirkungszentrum. Die besonderen Eigenschaften dieser Potentialschwänze stellen sicher, daß der Vorgang der Quantenreflexion in einer Entfernung von einigen tausend bis zehntausend atomaren Einheiten vom Wechselwirkungszentrum erfolgt, in einem Raumbereich also, in dem der Potentialverlauf bereits seine asymptotische Form angenommen hat. Das Quantenreflexionsverhalten von Atomen an Potentialen dieses Typs im physikalisch äußerst bedeutsamen Niederenergiebereich, das sind Energien, die knapp oberhalb der Potentialschwelle liegen, ist, wie gezeigt werden konnte [8], dem Verhalten eines kalten Atoms im System eines scharfen Stufenpotentials analog. Daraus folgt in Schwellennähe unmittelbar, daß die Reflexionswahrscheinlichkeit in der Umgebung von eins liegt und die Verschiebung des Schwerpunktes eines quantenreflektierten, atomaren Wellenpaketes die mittlere Streulänge des atomaren Potentials ist. Dies ändert sich erst für höhere als schwellennahe Energien.

Die Tatsache, daß der Vorgang der Quantenreflexion nur von der Energie der einfallenden Atome abhängt, macht diesen Mechanismus zu einem gegen äußere Einflüsse unempfindlichen Phänomen, das folglich für ungestörte atomare Systeme nicht vernachlässigt werden kann. Insbesondere die aus der Casimir-van der Waals-Theorie folgende Wechselwirkung von Atomen und Oberflächen via Vakuummoden des Lichtfeldes ist immer präsent und spielt eine wesentliche Rolle in vielen Bereichen der Quantenoptik, wo Atome in Hohlräumen gefangen werden, ebenso bei der Bose-Einstein-Kondensation. Der Grund, warum der Effekt der Quantenreflexion in diesen Bereichen bislang nur wenig Beachtung gefunden hat, mag darin liegen, daß in diesen Gebieten für gewöhnlich starke externe Felder zum Einsatz kommen, um die Atome in gewünschter Weise zu manipulieren. Die externen Felder sind typischerweise stärker als die natürliche Casimir-van der Waals-Wechselwirkung und verwischen daher deren Einfluß.

In der Vergangenheit war hauptsächlich die Quantenreflexionswahrscheinlichkeit Gegenstand ausgedehnter Untersuchungen, deren Ergebnisse in dem Übersichtsartikel von Friedrich und Trost [17] erschöpfend dargestellt sind. Die vorliegende Arbeit befaßt sich zuerst mit der eingehenden Untersuchung der Phase der Reflexionsamplitude, deren Verhalten Einblicke in die kinematischen Vorgänge der Quantenreflexion gewährt. Unsere Untersuchungen beziehen sich dabei auf den senkrechten Einfall eines Atoms oder eines atomaren Wellenpaketes auf das Zentrum der Wechselwirkung. Dieses wird in den zur Einfallrichtung senkrecht stehenden Richtungen als translationsinvari-

ant angenommen, damit reduziert sich das Problem auf die Lösung einer eindimensionalen Aufgabe. Diese faktische Eindimensionalität ist insbesondere für die Atom-Oberflächen-Wechselwirkung von Bedeutung. Aus der Casimir-van der Waals-Theorie ist bekannt, daß die Wechselwirkung von Atomen mit Oberflächen von den elektromagnetischen Eigenschaften des die Oberfläche konstituierenden Festkörpers abhängt. Ist der Festkörper magnetisch nicht permeabel, wird diese Abhängigkeit einzig durch seine dielektrische Funktion beschrieben. Die dielektrische Funktion eines Festkörpers ist, läßt man Kristallsymmetrien außer acht, im allgemeinen anisotrop. Da der Quantenreflexionsvorgang aber erst einige tausend bis zehntausend atomare Einheiten von der Oberfläche entfernt stattfindet, können auch diese möglichen Anisotropien in bester Näherung vernachlässigt werden. Damit entsteht die benötigte Translationsinvarianz, um das Problem auf eine eindimensionale Aufgabe zu reduzieren, die gleichzeitig ein realistisches Abbild der physikalischen Gegebenheiten und von hoher Allgemeinheit ist. Die vorangegangene Argumentation findet im Experiment, beispielsweise [39, 9], Unterstützung.

Die vorliegende Arbeit untersucht zuerst das kinematische Verhalten von quantenreflektierten Atomen an einfachen atomaren Potenzpotentialschwänzen. Die daraus gewonnenen Erkenntnisse werden nachfolgend auf Modelle der Atom-Oberflächenwechselwirkung angewandt, die sich für beliebige Atome in einem translationsinvarianten Atom-Oberflächenpotential als praktikabel erwiesen haben. Als außergewöhnlichen Sonderfall dieses Wechselwirkungstyps untersuchen wir danach $2p$ -Wasserstoff. Wasserstoff verfügt als einziges Element über entartete Eigenzustände. Wir untersuchen, wie diese Niveauentartung die Wechselwirkung von Wasserstoffatomen mit Oberflächen modifiziert und wie sie sich auf die Kinematik des Quantenreflexionsvorgangs auswirkt.

Die aus der Untersuchung der Kinematik der Quantenreflexion hervorgegangenen Ergebnisse und die der vorliegenden Arbeit vorausgegangenen Untersuchungen über die Reflexionswahrscheinlichkeit benutzen wir im folgenden zur Konstruktion eines einfachen und realistischen Modells einer atomoptischen Anwendung, einer Quantenreflexionsfalle. Ein von der Kettelergruppe am MIT durchgeführtes Experiment [35] zeigt bereits, daß ein Bose-Einstein-Kondensat durch die aus der Casimir-van der Waals-Theorie folgende Atom-Oberflächenwechselwirkung quantenreflektiert werden kann. Bei senkrechtem Einfall wurden dabei Reflexionswahrscheinlichkeiten von mehr als fünfzig Prozent gemessen. Das darf als außerordentlich gelten, insbesondere, weil alle vorausgegangenen Experimente zur Quantenreflexion immer nur den aus

technischen Gründen einfach zu handhabenden, streifenden Einfall benutzt haben. Mit dem Wissen um die Analogie zwischen Atom-Oberflächenpotentialen und scharfem Stufenpotential im Niederenergiebereich entwerfen wir das Modell einer Falle, die sich allein der Quantenreflexion bedient, um Atome in einem beschränkten Raumbereich festzuhalten. Das Fallenpotential ist dabei natürlich das Atom-Oberflächenpotential, das von der Natur von selbst zur Verfügung gestellt wird. In unseren Betrachtungen haben wir uns auf die Zeitentwicklung eines atomaren Wellenpaketes im ganzen beschränkt. Fragen nach interatomaren Wechselwirkungen innerhalb des Wellenpaketes, wie sie durch die Gross-Pitajewski-Gleichung beschrieben würden, haben wir vernachlässigt, wir betrachten ausschließlich Schrödingerdynamik und betrachten Wellenpaket als einzelnes Atom oder bereits als Kondensat. atomares Kondensat annehmen. Geometrieabhängig konnte mit diesen Rechnungen eine durch das Fallenpotential bis um das Hundertfache erhöhte atomare Dichte erreicht werden – im Vergleich zu einem frei zerfließenden Wellenpaket. Die Zeitskalen des durch das Fallenpotential verlangsamten Zerfalls des Anfangszustandes sind dabei sogar makroskopisch und liegen im Zehntelsekundenbereich.

Teil I

Theorie

Kapitel 2

Semiklassische Theorie

In diesem Kapitel wird die Theorie der semiklassischen Quantenmechanik dargestellt. Die Darstellung beschränkt sich auf all jene Tatsachen, die zur Formulierung und Begründung der Theorie der Quantenreflexion vonnöten sind. Zuerst werden die WKB-Theorie [41, 27, 5] und ihr Gültigkeitsbereich diskutiert, danach folgen einige Bemerkungen zum klassischen und antiklassischen Limes der Schrödingergleichung.

2.1 Die WKB-Theorie

Die Schrödingergleichung selbst eignet sich nicht zur Untersuchung des Grenzbereichs von Quantenmechanik und klassischer Mechanik, dazu muß man sie in die quantenmechanische Hamilton-Jacobi-Gleichung transformieren. Die Schrödingergleichung

$$\Psi''(x) + \frac{p^2(x)}{\hbar^2}\Psi(x) = 0, \quad p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))} \quad , \quad (2.1)$$

wobei $p(x)$ der lokale, klassische Impuls ist, ist vermöge der Transformation

$$\Psi(x) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x) \right] \quad (2.2)$$

der quantenmechanischen Hamilton-Jacobi-Gleichung äquivalent

$$(S'(x))^2 - i\hbar S''(x) = p^2(x) \quad . \quad (2.3)$$

Die Funktion $S(x)$ hat die Dimension einer Wirkung, daher ist die Bezeichnung quantenmechanische Hamilton-Jacobi-Gleichung gerechtfertigt. Setzt man in ihr $\hbar = 0$, so erhält man die Hamilton-Jacobi-Gleichung der klassischen Mechanik.

Ein quantenmechanisches System befindet sich in seinem semiklassischen Limes, wenn die klassische Wirkung $S_0(x)$ groß ist gegen \hbar . Ist dies der Fall, so kann man mit der Methode der sukzessiven Approximation eine näherungsweise Lösung für (2.3) erhalten, indem man die volle quantenmechanische Wirkung nach Potenzen von \hbar entwickelt,

$$S(x) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^{\nu} S_{\nu}(x) \quad . \quad (2.4)$$

Setzt man dies in (2.3) ein und ordnet nach Potenzen von \hbar , so entsteht eine unendliche Hierarchie von Gleichungen, die sukzessive gelöst werden müssen,

$$\begin{aligned} (S'_0(x))^2 - p^2(x) &= 0, \\ i\hbar (S''_0(x) + 2S_0(x)S'_1(x)) &= 0, \\ \hbar^2 (S''_1(x) + 2S'_0(x)S'_2(x) + (S'_1(x))^2) &= 0, \quad \dots \quad . \end{aligned} \quad (2.5)$$

Die nullte Ordnung führt auf

$$S'_0(x) = \pm p(x) \Rightarrow S_0(x) = \pm \int p(x) dx \quad (2.6)$$

und entspricht dem rein klassischen Beitrag. Die quantenmechanische Korrektur erster Ordnung ergibt

$$S'_1(x) = -\frac{S''_0(x)}{2S'_0(x)} = -\frac{p'(x)}{2p(x)}, \Rightarrow S_1(x) = -\frac{1}{2} \ln[p(x)] \quad . \quad (2.7)$$

Setzt man die so gewonnenen Ergebnisse in (2.2) ein, so erhält man eine Wellenfunktion, die bis zur ersten Ordnung in \hbar exakt ist, die WKB-Wellenfunktion

$$\begin{aligned} \Psi_{\text{WKB}}(x) &= \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx' \right] \\ &+ \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx' \right] \quad . \end{aligned} \quad (2.8)$$

In einem klassisch erlaubten Raumbereich ist die WKB-Wellenfunktion eine Superposition einer links- und einer rechtslaufenden Welle. Die untere Integrationsgrenze x_0 stellt einen Referenzpunkt für die Integration dar, der immer genau spezifiziert werden muß. Gewöhnlich ist dieser Referenzpunkt durch den klassischen Umkehrpunkt gegeben.

2.2 Der Gültigkeitsbereich der WKB-Theorie

Die WKB-Wellenfunktion (2.8) divergiert an den klassischen Umkehrpunkten des Systems, weil dort der klassische, lokale Impuls $p(x)$ verschwindet. Hingegen ist sie in einiger Entfernung von einem klassischen Umkehrpunkt eine recht gute Näherung zur exakten Lösung der Schrödingergleichung. Die Güte dieser Näherung hängt aber keineswegs von der Ordnung der Näherung wird mit höherer Ordnung, aber nicht asymptotisch besser, zeigen doch die ausgedehnten Untersuchungen von Frömann und Frömann [18], daß die Konvergenz der WKB-Reihe mit zunehmender Ordnung eher an Qualität verliert. Auch die immer noch in den Lehrbüchern zu findende Argumentation, daß die de Broglie-Wellenlänge des Systems klein und von schwacher Variation sein müsse, ist eher ein hinreichendes als ein notwendiges Kriterium für die Güte der Näherung. Der Gültigkeitsbereich der WKB-Theorie kann am besten durch die Einführung eines *Quantenbereichs* verstanden werden, [3, 13, 17], an dem wir uns hier orientieren werden.

Um herauszufinden, wie gut die WKB-Wellenfunktion die Schrödingergleichung erfüllt, setzt man (2.8) in (2.1) ein und erhält

$$\Psi_{\text{WKB}}''(x) + \frac{p^2(x)}{\hbar^2} \Psi_{\text{WKB}}(x) + \left(\frac{p''(x)}{2p(x)} - \frac{3(p'(x))^2}{4p^2(x)} \right) \Psi_{\text{WKB}}(x) = 0 \quad . \quad (2.9)$$

Der dritte Term auf der linken Seite entspricht einem zusätzlichen Potential. Ohne diesen Term wäre die entstandene Differentialgleichung mit der Schrödingergleichung identisch. Daraus kann gefolgert werden, daß die WKB-Wellenfunktion genau dann eine gute Näherung zur exakten Lösung der Schrödingergleichung darstellt, wenn der zusätzliche Term klein ist im Vergleich zu $p^2(x)/\hbar^2$. Aus dieser Bedingung folgt die Definition der Quantalität eines Systems.

$$\mathcal{Q}(x) = \hbar^2 \left| \frac{p''(x)}{2p^3(x)} - \frac{3(p'(x))^2}{4p^4(x)} \right| \quad . \quad (2.10)$$

Wenn die Bedingung $Q(x) \ll 1$ erfüllt ist, dann verhält sich das System nahezu klassisch und die WKB-Wellenfunktion ist eine gute Approximation zur exakten Lösung der Schrödingergleichung. Ist die Quantalität nicht klein gegen eins, so verhält sich das System vollkommen quantenmechanisch, wie beispielsweise an den klassischen Umkehrpunkten, und die WKB-Näherung bricht zusammen.

2.3 Klassischer und antiklassischer Limes der Schrödingergleichung

Im Sprachgebrauch der Physik hat sich eingebürgert, es könne zum klassischen Limes eines Quantensystems übergegangen werden, indem man das Plancksche Wirkungsquantum \hbar gegen Null streben läßt. Die Vorstellung eines solchen Grenzprozesses ist etwas unglücklich, denn es handelt sich bei \hbar nicht um einen *frei* wählbaren Parameter, sondern um eine Naturkonstante. Eine befriedigendere Definition von klassischem und antiklassischem Grenzfall wurde in [17] gegeben. Ist die klassische Wirkung des Systems sehr viel größer als das Wirkungsquantum, $S_0 \gg \hbar$, so befindet sich das System in seinem klassischen Limes, ist hingegen die klassische Wirkung sehr viel kleiner als das Wirkungsquantum, $S_0 \ll \hbar$, so liegt der antiklassische Limes vor.

Diese sehr allgemein gefaßte Definition kann genauer analysiert werden, wenn man die potentielle Energie des betrachteten Systems genauer spezifiziert. Eine große und physikalisch außerordentlich wichtige Klasse von Potentialen sind die homogenen Potentiale,

$$U_g(\lambda x) = \lambda^g U_g(x) \quad . \quad (2.11)$$

Dabei gibt g den Grad der Homogenität an. Prominente Beispiele sind der harmonische Oszillator für $g = 2$ und die Coulombwechselwirkung für $g = -1$.

Eine klassische Bewegung in einem homogenen Potential besitzt die Eigenschaft der mechanischen Ähnlichkeit [28]. Die mechanische Ähnlichkeit ist eine Skalierungseigenschaft, die besagt, daß zwei klassische Trajektorien für zwei Energien E, E' in einem homogenen Potential durch eine Skalentransformation miteinander zusammenhängen,

$$E' = \sigma^g E, \quad x' = \sigma x \quad . \quad (2.12)$$

Für die klassische Wirkung folgt daraus

$$\begin{aligned} S_0(\sigma^g E) &= \sqrt{2m} \int dx' \sqrt{E' - U_g(x')} \\ &= \sigma^{\frac{g}{2}+1} \sqrt{2m} \int dx \sqrt{E - U_g(x)} \quad . \end{aligned} \quad (2.13)$$

Eine Reskalierung mit $\epsilon = \sigma^g$ liefert schließlich

$$S_0(\epsilon E) = \epsilon^{\frac{1}{2} + \frac{1}{g}} S_0(E) \quad . \quad (2.14)$$

Dieses Skalengesetz besagt, daß die klassische Wirkung dann und nur dann mit der Energie wächst, wenn, $\epsilon > 1$,

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{g} > 0 \quad \Rightarrow \quad g > 0, \quad \text{oder} \quad g < -2 \quad . \quad (2.15)$$

Für Bewegungen in einem homogenen Potential vom Grad $g > 0$ wird der semiklassische Limes $S_0 \gg \hbar$ erreicht, wenn die Energie $|E| \rightarrow \infty$ strebt; für $|E| \rightarrow 0$ wird hingegen der antiklassische Limes erreicht. Gleiches gilt für homogene Potentiale vom Grad $g < -2$. Potentiale dieses Typs,

$$U(r) = -\frac{C_\alpha}{r^\alpha} \quad , \quad (2.16)$$

treten bei interatomaren und Atom-Oberflächenwechselwirkungen auf. Die Untersuchung ihres Verhaltens bezüglich der Quantenreflexion ist Thema der vorliegenden Arbeit.

Ein Sonderfall stellt das Coulombpotential, $g = -1$, dar. Ein Coulombsystem, beispielsweise ein Wasserstoffatom, strebt gegen seinen klassischen Limes für $|E| \rightarrow 0$ und erreicht seinen antiklassischen Limes für $|E| \rightarrow \infty$, den Bereich der relativistischen Quantenmechanik und der Quantenelektrodynamik.

Kapitel 3

Theorie der Atom-Oberflächen-Wechselwirkung

Die durch die Vakuummoden des Lichtfeldes erzeugte Wechselwirkung eines Atoms mit einer ideal leitenden oder dielektrischen Oberfläche ist ein Spezialfall der Casimir-van der Waals-Wechselwirkung, die generell zwischen polarisierbaren Medien durch das Vakuum des Lichtes erzeugt wird. Die Literatur zur Casimir-van der Waals-Theorie ist so überaus mannigfaltig, daß es uns angebracht scheint, *expressis verbis* nur die wichtigsten Meilensteine in der theoretischen Beschreibung des Casimir-Effektes zu erwähnen. Relativistische Korrekturen zur London-van der Waals-Wechselwirkung, der statischen Dipolwechselwirkung zwischen polarisierbaren Medien, wurden zuerst von Casimir und Polder [6] für den Fall eines Atoms in einem Halbraum mit Hilfe der quantenmechanischen Störungstheorie berechnet. Es folgte eine feldtheoretische Bearbeitung des Casimir-Effektes durch Lifschitz [29] und auf diesem aufbauend, eine streng quantenfeldtheoretische Formulierung durch Dschaloschinsky, Lifschitz und Pitajewsky [10] auf der Basis des elektromagnetischen Vektorpotentials und seiner tensoriellen Greenschen Funktion. Eine Theorie, die auf dem elektromagnetischen Feld selbst und seiner dyadischen Greenschen Funktion aufbaut, wurde von Schwinger, de Raad und Milton [38] formuliert. Unter neueren Arbeiten zur Herleitung der Casimir-van der Waals-Theorie ist die besonders elegante Formulierung von Tikochinsky und Spruch [40] erwähnenswert, die allerdings nur für Atome im Grundzustand gilt. Formulierungen, die auch angeregte Zustände eines Atoms vor einer polarisierbaren Oberfläche berücksichtigen, stammen beispielsweise von Barton [2] und Meschede, Jhe und Hinds [31], die zur Herleitung der Casimir-van der

Waals-Wechselwirkung die Theorie des linearen Responses fruchtbar machen.

Die angesprochenen Arbeiten geben einen marginalen Einblick in die übergroße Breite und Reichhaltigkeit der Casimir-van der Waals-Wechselwirkung, deren Darstellung dieses Kapitel gewidmet sein soll. Wir denken, daß sich der Zugang von Barton [2] zur Darstellung der Atom-Oberflächenwechselwirkung am besten eignet, da er lediglich mit der quantenmechanischen Störungstheorie auskommt und keine feldtheoretischen Methoden verwendet. Zudem ist die Bartonsche Formulierung etwas geschliffener als die der ursprünglichen Arbeit von Casimir und Polder, der doch das eigentliche Recht, als Vorlage zu fungieren, zukäme. Zur Darstellung des Casimir-Effektes selbst beziehen wir uns auf das Buch von Milton [32].

3.1 Der Casimir-Effekt – die Kraft aus dem Nichts

Zur Herleitung des Casimir-Effektes betrachten wir zwei planparallele, ideal leitende Platten von infinitesimaler Ausdehnung an den Orten $z = 0$ und $z = a$. Im Raum zwischen den Platten herrscht Vakuum, somit sind nur die Vakuummoden des elektromagnetischen Feldes dort anwesend. Die Nullpunktsenergie des elektromagnetischen Feldes folgt aus der Summation der Energie der einzelnen Moden

$$E = \sum \frac{1}{2} \omega = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \sqrt{k^2 + \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2} \quad , \quad (3.1)$$

wobei $c, \hbar = 1$ gesetzt wurden und k den transversalen Anteil des Impulses darstellt. Da das zweidimensionale Integral über k divergiert, benutzt man zu seiner Berechnung die dimensionale Regularisierung in Verbindung mit der Schwingerschen Parametrisierung

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \int_0^{\infty} dt \frac{t^{-3/2}}{\Gamma[-1/2]} \exp \left[-t \left(k^2 + \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \right) \right] \\ &= - \frac{1}{2^{d+2} \pi^{d/2+1}} \frac{1}{a^{d+1}} \Gamma \left[1 + \frac{d}{2} \right] \zeta(d+2) \quad , \end{aligned} \quad (3.2)$$

wobei ζ die Riemannsche Zetafunktion ist. Die räumliche Dimension des Systems ist im vorliegenden Fall $d = 2$. Setzt man dies ein, so folgt für

die elektromagnetische Nullpunktsenergie zwischen den Platten

$$E = -\frac{\pi^2}{1440} \frac{1}{a^3} . \quad (3.3)$$

Die Energie zwischen den beiden Platten ist *attraktiv* und geht mit der inversen, dritten Potenz des Abstandes. Dieses Potenzgesetz erinnert an die Dipol-Dipol-Wechselwirkung oder London-van der Waals-Wechselwirkung und hat ihren Ursprung in der Polarisation der Platten durch die Vakuummoden des Lichtfeldes. So entsteht eine anziehende Wechselwirkung. Tauscht man beispielsweise die Platte am Punkt $z = a$ gegen ein Atom, so bleibt die Geometrie des Problems vollkommen erhalten, lediglich die innere Struktur des Atoms führt auf eine etwas kompliziertere Berechnung der Vakuumenergie.

3.2 Herleitung der Atom-Oberflächen-Wechselwirkung

Zur Herleitung der Atom-Oberflächen-Wechselwirkung betrachten wir wieder eine Oberfläche bei $z = 0$ und ein Atom am Ort z . Atom und Oberfläche wechselwirken durch den Austausch von Photonen, die aus dem Lichtfeld des Vakuums stammen. Die Gesamtenergie des Systems ist gegeben durch seine Hamiltonfunktion

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_{\text{Atom}} + U_{\text{stat}} + \mathcal{H}_{\text{WW}} \\ \mathcal{H}_{\text{WW}} &= -e\mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{p}_i/m + e^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}_i)^2/2m \\ \hbar &= 1 = c \\ \Rightarrow e^2 &= \alpha_{\text{fs}} \quad (= \text{Feinstrukturkonstante}) . \end{aligned} \quad (3.4)$$

Der Term $\mathcal{H}_{\text{Atom}}$ ist die atomare Hamiltonfunktion, aus der die ungestörten Eigenzustände ermittelt werden können. Der zweite Term U_{stat} enthält alle elektrostatischen Wechselwirkungen des Atoms mit der Oberfläche, und der letzte Term \mathcal{H}_{WW} enthält die Wechselwirkung des Atoms mit dem transversalen elektromagnetischen Feld.

Das transversale elektromagnetische Feld ist in der Coulombbeziehung quantisiert, $\vec{\nabla} \cdot \mathbf{A} = 0$. Die transversal-elektrischen und transversal-magnetischen Anteile können durch die Eigenmoden des Feldes als Fourierintegral wie folgt

dargestellt werden

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}(\mathbf{r}_i)^E &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk_z \int_{-\infty}^\infty \frac{d^2 k_\parallel}{\sqrt{\omega(k)}} \hat{a}_1(k_\parallel, k_z) (\vec{e}_{k_\parallel} \times \vec{e}_z) \sin[k_z z] \exp[i\mathbf{k}\rho] \\
&\quad + (\text{h.k.}), \\
\mathbf{A}(\mathbf{r}_i)^M &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk_z \int_{-\infty}^\infty \frac{d^2 k_\parallel}{\sqrt{\omega(k)}} \hat{a}_2(k_\parallel, k_z) \\
&\quad \left[i\vec{e}_{k_\parallel} \frac{k_z}{\omega(k)} \sin[k_z z] - \vec{e}_z \frac{k_\parallel}{\omega(k)} \cos[k_z z] \right] \exp[i\mathbf{k}\rho] + (\text{h.k.}) \quad .
\end{aligned} \tag{3.5}$$

Es ist \mathbf{r}_i die Koordinate eines Elektrons im Atom, ρ die Koordinate parallel zur Oberfläche, $\omega(k) = \sqrt{k_\parallel^2 + k_z^2}$ die Dispersionsrelation. Die photonischen Vernichtungsoperatoren \hat{a} gehorchen der Kommutationsrelation

$$[\hat{a}_i(k_\parallel, k_z); \hat{a}_j^+(k'_\parallel, k'_z)] = \delta_{ij} \delta(k_\parallel - k'_\parallel) \delta(k_z - k'_z) \quad . \tag{3.6}$$

Die nachfolgend dargestellte Wechselwirkung zwischen Atom und Photonenfeld wird bis zur zweiten Ordnung Störungstheorie in e^2 , e die elektrische Ladung, behandelt.

3.2.1 Die statische Dipol-Dipol-Wechselwirkung

Der statische Anteil der Dipol-Dipol-Wechselwirkung ist gegeben durch die Hälfte der Energie, die nötig ist, um einen Dipol aus der Unendlichkeit zur Entfernung z von der Oberfläche zu bringen. Die Hälfte der Energie, weil der Spiegeldipol ja ebenfalls aus der entgegengesetzten Richtung aus der Unendlichkeit zum Punkt $-z$ wandert. Im Abstand z von der Oberfläche ist die statische Dipol-Dipol-Energie somit

$$U_{\text{stat}}(z) = \frac{1}{2} \frac{\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{d}}' - 3(2z\vec{e}_z \cdot \hat{\mathbf{d}})(2z\vec{e}_z \cdot \hat{\mathbf{d}}')}{(2z)^5} \quad , \tag{3.7}$$

wobei $\hat{\mathbf{d}} = e\hat{\mathbf{r}}$ der atomare Dipoloperator ist, $\hat{\mathbf{r}}$ der Ortsoperator eines Elektrons und $\hat{\mathbf{d}}'$ sein Spiegelbild in der Oberfläche. Der Abstand ist mit $2z$ zu nehmen, weil die beiden Dipole je einen Abstand $|z|$ von der Oberfläche haben, also insgesamt $2|z|$. Zerlegt man das Dipolmoment in seine orthogonale z -Komponente \mathbf{d}_z und seine transversale Komponente \mathbf{d}_\parallel , dann kann man

den aus der Methode der Spiegelladungen ermittelten Zusammenhang zwischen dem Dipol und seinem Spiegelbild angeben als

$$\hat{\mathbf{d}}_z = \hat{\mathbf{d}}'_z, \quad \hat{\mathbf{d}}_{\parallel} = -\hat{\mathbf{d}}'_{\parallel} \quad . \quad (3.8)$$

Setzt man dies ein, dann folgt die statische Dipol-Dipol-Wechselwirkung zu

$$U_{\text{stat}}(z) = -\frac{\langle n | \hat{d}_z^2 + \frac{1}{2}\hat{\mathbf{d}}_{\parallel}^2 | n \rangle}{8z^3} \quad . \quad (3.9)$$

Die statische Dipol-Dipol-Wechselwirkung wird auch London-van der Waals-Wechselwirkung oder nur van der Waals-Wechselwirkung genannt. Sie beruht auf dem instantanen Austausch von Photonen des Atoms mit der Oberfläche und ist daher nur im *Nahbereich* gültig. Sie bricht zusammen, wenn die Entfernung von der Oberfläche größer wird als eine photonische Wellenlänge, weil dann die endliche Laufzeit des Lichtes vom Atom zur Oberfläche und wieder zurrück wesentlich wird und zu Retardierungseffekten führt.

3.2.2 Die universelle Selbstwechselwirkung des Photonenfeldes

In diesem Abschnitt betrachten wir den Energiebeitrag

$$\Delta E_1 = \frac{e^2}{2m} \langle n | \mathbf{A}^2(\mathbf{r}_i) | n \rangle \quad , \quad (3.10)$$

der schon in zweiter Ordnung von e ist.

Dieser Beitrag ist ein Selbstwechselwirkungsbeitrag des Photonenfeldes, weil hier keine direkte Kopplung an das Atom stattfindet. Er ist universell, weil er für jeden atomaren Zustand, ob Grundzustand oder angeregter Zustand, dasselbe Ergebnis liefert. Sein Ursprung ist zudem rein quantenmechanischer Natur und verfügt in der klassischen Elektrodynamik über keine Entsprechung.

Eine längere Rechnung ergibt

$$\Delta E_1 = -\frac{e^2}{2m\pi^2} \int_0^\infty dk_z \int_{-\infty}^\infty d^2k_{\parallel} \frac{k_z^2}{\omega^3(k)} \cos[2k_z z] \quad . \quad (3.11)$$

Das Ausführen der Integrale liefert

$$\begin{aligned}\Delta E_1 &= -\frac{e^2}{m\pi} \int_0^\infty dk_z k_z \cos[2k_z z] \\ &= -\frac{e^2}{m\pi} \frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{z} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty d\lambda \sin[\lambda] e^{-\epsilon\lambda} \\ &= \frac{e^2}{4m\pi z^2} .\end{aligned}\tag{3.12}$$

Die universelle Selbstwechselwirkung des elektromagnetischen Feldes liefert einen *positiven* Energiebeitrag. Dieser Energiebeitrag modifiziert die Atom-Oberflächen-Wechselwirkung im *Nahbereich*.

3.2.3 Die Kopplung zwischen Atom und Photonenfeld

Die durch die Kopplung von Atom und Photonenfeld erzeugte Energieverschiebung in zweiter Ordnung Störungstheorie lautet

$$\Delta E_2 = \frac{e^2}{m^2} \mathcal{P} \sum_m \frac{|\langle n | \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \cdot \hat{\mathbf{p}}_i | m \rangle|^2}{E_m - E_n} .\tag{3.13}$$

Das Symbol \mathcal{P} bezeichnet den Cauchyschen Hauptwert, der allerdings nur benötigt wird, wenn sich das Atom in einem angeregten Zustand befindet. Eine längliche und extrem aufwendige Rechnung führt auf

$$\begin{aligned}\Delta E_2 &= \frac{1}{\pi} \sum_m (E_m - E_n)^2 \left(\frac{1}{2} \mathbf{d}_\parallel^2 - d_z^2 \right) f_1(x) \\ &\quad + \frac{1}{\pi} \sum_m (E_m - E_n)^2 \left(\frac{1}{2} \mathbf{d}_\parallel^2 + d_z^2 \right) [f_2(x) + f_3(x)] .\end{aligned}\tag{3.14}$$

Die Hilfsfunktionen $f_i(x)$ sind gegeben durch

$$\begin{aligned}f_1(x) &= \frac{\pi |E_m - E_n|}{2x} + \frac{E_m - E_n}{x} \left(\sin[x] \text{Ci}[x] - \cos[x] \text{Si}[x] - \frac{1}{2} \pi (1 - \cos[x]) \right) \\ &\quad - \theta[-(E_m - E_n)] \pi |E_m - E_n| \frac{1 - \cos[x]}{x} ,\end{aligned}\tag{3.15}$$

$$f_2(x) = -\frac{\pi |E_m - E_n|}{x^3} + (E_m - E_n) (\sin[x]\text{Ci}[x] - \cos[x]\text{Si}[x]) \left(\frac{1}{x} - \frac{2}{x^3} \right) + 2\frac{E_m - E_n}{x^2} (\sin[x]\text{Ci}[x] - \cos[x]\text{Si}[x]) - \frac{1}{x^2} + \frac{1}{2}\pi \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{1 - \cos[x]}{x} \right) , \quad (3.16)$$

$$f_3(x) = \theta [-(E_m - E_n)] \pi |E_m - E_n| \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{1 - \cos[x]}{x} \right) . \quad (3.17)$$

Dabei ist die Variable $x = 2 |E_m - E_n| z$. Die angegebenen Ausdrücke gelten für den Grundzustand sowie für alle angeregten Zustände eines Atoms. Die Teile der Formel, die die Stufenfunktion $\theta [-(E_m - E_n)]$ enthalten, tragen nur für Energien $E_m < E_n$ bei. Ist daher E_n der Grundzustand, entfallen diese Terme ersatzlos.

3.2.4 Asymptotische Limiten der Energieverschiebung

Die im vorangegangenen hergeleiteten Ausdrücke für die atomare Energieverschiebung sind von sehr allgemeiner Form und in dieser schwer zu deuten. Daher bietet sich eine Untersuchung der asymptotischen Limiten an, des Nahbereichs $|E_m - E_0| z \ll 1$ und des Fernbereichs $|E_m - E_0| z \gg 1$. Die daraus erhaltenen Grenzfälle können physikalisch gut gedeutet werden.

Verhalten im Nahbereich

Ein schon aus der klassischen Theorie bekannter Grenzfall ist der der statischen Dipol-Dipol-Wechselwirkung. Die asymptotische Entwicklung im Nahbereich liefert diesen Term als Hauptbeitrag der Atom-Oberflächen-Wechselwirkung:

$$\Delta E \approx -\frac{1}{8z^3} \left\langle n \left| \hat{d}_z^2 + \frac{1}{2} \hat{\mathbf{d}}_{\parallel}^2 \right| n \right\rangle + \frac{e^2}{4m\pi z^2} + \frac{e^2}{4m^2 z} \left\langle n \left| \frac{1}{2} \hat{\mathbf{p}}_{\parallel}^2 - \hat{p}_z^2 \right| n \right\rangle . \quad (3.18)$$

Der zweite Term kommt von der universellen Selbstwechselwirkung des Photonenfeldes, und der dritte Term ist eine Anisotropiekorrektur zur kinetischen Energie, der verschwindet, wenn man einen sphärischen Zustand betrachtet. Im Limes $z \rightarrow 0$ ist der erste Term, die statische Dipol-Dipol-Wechselwirkung, wesentlich singulärer als die beiden quantenmechanischen Korrekturen, so daß diese in guter Näherung vernachlässigt werden können.

Die Energie im Nahbereich ist somit gegeben als

$$U(z) = -\frac{C_3}{z^3}, \quad C_3 = \frac{1}{8} \left\langle n \left| \hat{d}_z^2 + \frac{1}{2} \hat{\mathbf{d}}_{\parallel}^2 \right| n \right\rangle. \quad (3.19)$$

Verhalten im Fernbereich

Der asymptotische Energiebeitrag im Fernbereich lautet

$$\begin{aligned} \Delta E \approx & -\frac{2\alpha_{\parallel}(0) + \alpha_z(0)}{8\pi z^4} \\ & + \sum_m \theta [-(E_m - E_n)] |E_m - E_n|^3 \left| \left\langle m \left| \hat{\mathbf{d}}_{\parallel} \right| n \right\rangle \right|^2 \\ & \times \left(\frac{\cos[x]}{x} - \frac{\sin[x]}{x^2} - \frac{\cos[x]}{x^3} \right) \\ & - \sum_m \theta [-(E_m - E_n)] |E_m - E_n|^3 \left| \left\langle m \left| \hat{d}_z \right| n \right\rangle \right|^2 \\ & \times \left(\frac{\sin[x]}{x^2} + \frac{\cos[x]}{x^3} \right), \end{aligned} \quad (3.20)$$

dabei ist $\alpha_i(0)$ die statische Dipolpolarisierbarkeit

$$\alpha_i(0) = 2 \sum_m \frac{\left| \left\langle n \left| \hat{d}_i \right| m \right\rangle \right|^2}{E_m - E_n}. \quad (3.21)$$

Der führende Term ist das retardierte Casimir-Polder-Potential [6]

$$U(z) = -\frac{C_4}{z^4}, \quad C_4 = \frac{2\alpha_{\parallel}(0) + \alpha_z(0)}{8\pi}, \quad (3.22)$$

wie es für Atome im Grundzustand gilt. Der zweite Term wird durch die Stufenfunktion in diesem Falle Null. Befindet sich das Atom aber in einem angeregten Zustand, dann wird das Verhalten im Fernbereich von der Summe in (3.20) dominiert, die asymptotisch wie $1/z$ abfällt, aber sonst stark von der inneren Struktur des Atoms abhängt und außerdem stark oszillieren kann. Im anwendungsbezogenen, zweiten Teil dieser Arbeit wird der Fall eines angeregten Atoms vor einer Oberfläche für die Quantenreflexion am Beispiel von metastabilem Wasserstoff diskutiert. Daran wird deutlich werden, wie grundsätzlich verschieden das Verhalten von Atomen im Grundzustand und in einem angeregten Zustand ist.

3.2.5 Erweiterung auf Dielektrika

Ist die Oberfläche nicht ideal leitend, sondern dielektrisch, werden die Potentialstärken als Funktion der Dielektrizitätskonstanten ϵ leicht modifiziert [40, 43]. Bezeichnet $C_3(\infty), C_4(\infty)$ jeweils die van der Waals- respektive die Casimir-Polder-Stärke des Potentials für eine ideal leitende Oberfläche, so findet man im dielektrischen Fall

$$C_3(\epsilon) = \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1} C_3(\infty), \quad C_4(\epsilon) = \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1} \Phi(\epsilon) C_4(\infty) \quad , \quad (3.23)$$

wobei die charakteristische Funktion $\Phi(\epsilon)$ gegeben ist als

$$\begin{aligned} \Phi(\epsilon) &= \frac{\epsilon + 1}{2(\epsilon - 1)} \int_0^\infty dp \frac{h(p + 1, \epsilon)}{p + 1}, \\ h(p, \epsilon) &= \frac{\sqrt{\epsilon - 1 + p^2} - p}{\sqrt{\epsilon - 1 + p^2} + p} + (1 - 2p^2) \frac{\sqrt{\epsilon - 1 + p^2} - \epsilon p}{\sqrt{\epsilon - 1 + p^2} + \epsilon p} \quad . \end{aligned} \quad (3.24)$$

Die charakteristische Funktion $\Phi(\epsilon)$ wächst monoton vom Wert $\Phi(1) = \frac{23}{30}$ für Isolatoren zum Wert $\Phi(\infty) = 1$ für ideal leitende Oberflächen an. Anhand von (3.23) sieht man, daß die Potentialstärken durch ein Dielektrikum verkleinert werden. Im Falle eines Isolators verschwindet das Atom-Oberflächen-Potential, wie es sein muß.

Kapitel 4

Theorie der Quantenreflexion

In diesem Kapitel wird die Theorie der Quantenreflexion dargestellt. Die Quantenreflexion ist ein reiner Quanteneffekt, bei dem ein Teilchen, das sich durch einen klassisch erlaubten Raumbereich bewegt, reflektiert wird, ohne einen klassischen Umkehrpunkt zu erreichen. Die asymptotisch freie Bewegung des betrachteten Teilchens ist rein klassisch, wenn das Potential im Unendlichen auf Null abgefallen ist, wird aber zunehmend quantenmechanischer in Raumbereichen, in denen das Potential nicht vernachlässigt werden kann. Für Potentiale allerdings, die singulärer als $-1/z^2$ sind, wird die Bewegung des Teilchens für kleine Abstände wieder klassisch. Diese kleinen Abstände sind typischerweise allerdings noch sehr groß gegen einige atomare Einheiten. Die innere, klassische Raumregion und die asymptotisch freie Raumregion sind durch die bereits in Kapitel 1 diskutierte Quantenregion (2.10) getrennt, in der die Bewegung des Teilchens extrem quantenmechanisch ist. Die Quantenregion wirkt dabei wie ein zusätzlicher Potentialberg, an dem das einfallende Teilchen quantenreflektiert wird. Sie liegt typischerweise einige tausend bis zehntausend atomare Einheiten vom klassischen Innenbereich entfernt. Es konnte gezeigt werden [14, 33], daß in diesem Bereich eine verallgemeinerte Umkehrpunktsbedingung gilt

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = |V(r_E)| \quad , \quad (4.1)$$

bei der die kinetische Energie gleich dem Absolutbetrag des Potentials ist. In der Umgebung des Punktes r_E findet die Quantenreflexion statt. (Siehe dazu Abbildung 4.1.) Im weiteren wird, bevor die Theorie der Quantenreflexion allgemein diskutiert wird, das prototypische Beispiel der einfachen Poten-

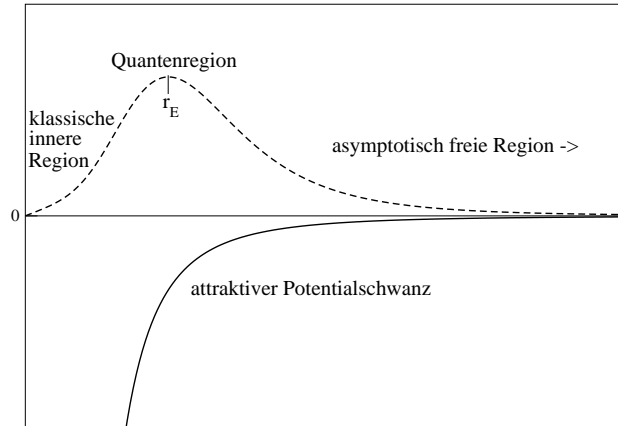


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung eines typischen atomaren Potentialverlaufs und seiner Quantenregion.

tialstufe betrachtet. Es eignet sich am besten um ein Gefühl zu entwickeln für das, was vorgeht.

4.1 Die einfache Potentialstufe

Wir betrachten ein System mit dem Stufenpotential, wie es in jedem Lehrbuch über Quantenmechanik zu finden ist,

$$U(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} K_0^2 \theta[a - x] \quad . \quad (4.2)$$

Die Stufe selbst befindet sich am Ort $x = a$. Fällt nun von rechts ein Teilchen ein, dann lautet die Wellenfunktion des Systems

$$\begin{aligned} \Psi_{\text{I}}(x) &= \exp[-ik_{\text{I}}x] + R_r(k) \exp[ik_{\text{I}}x] : x > a \quad , \\ \Psi_{\text{II}}(x) &= T(k) \exp[-ik_{\text{II}}x] : x < a \quad , \\ k_{\text{I}} &= k, \quad k_{\text{II}} = \sqrt{k^2 + K_0^2} \quad . \end{aligned} \quad (4.3)$$

Aus den logarithmischen Anschlußbedingungen im Punkt $x = a$ folgt für die Reflexionsamplitude

$$R_r(k_{\text{I}}) = \frac{k_{\text{I}} - k_{\text{II}}}{k_{\text{I}} + k_{\text{II}}} \exp[-i2k_{\text{I}}a] = \frac{k_{\text{II}} - k_{\text{I}}}{k_{\text{I}} + k_{\text{II}}} \exp[i(\pi - 2k_{\text{I}}a)] \quad . \quad (4.4)$$

Die Reflexionsamplitude ist, so auch hier, im allgemeinen komplex. Ihr Betragsquadrat $|R_r(k_I)|^2 = \left| \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}} \right|^2$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der das einfallende Teilchen quantenreflektiert wird. Die Wahrscheinlichkeit quantenreflektiert zu werden, ist um so höher, je näher die Energie des einfallenden Teilchens der Potentialschwelle liegt. Man findet folgendes Schwellengesetz

$$\lim_{k_I \rightarrow 0} |R_r(k_I)|^2 \approx 1 - 4bk_I + \mathcal{O}(k_I^2), \quad b = \frac{1}{K_0} \quad . \quad (4.5)$$

Im schwelennahen Bereich liegt die Reflexionswahrscheinlichkeit damit in der Nähe von einhundert Prozent.

Der reflektierte Anteil der Wellenfunktion folgt zu

$$\begin{aligned} \Psi_{I,R}(x) &= \frac{k_{II} - k_I}{k_I + k_{II}} \exp[ik_I x + i(\pi - 2k_I a)] \\ &= |R_r(k_I)| \exp[ik_I x + i\phi(k_I)] \quad , \end{aligned} \quad (4.6)$$

mit der Phasenfunktion

$$\phi(k_I) = \pi - 2ak_I \quad . \quad (4.7)$$

Die Phase der Reflexionsamplitude gibt an, wie weit der reflektierte Anteil der Wellenfunktion des Teilchens durch den Reflexionsvorgang räumlich verschoben wurde. In Vorgriff auf die weiter unten geführte, ausführlichere Herleitung kann man sagen, die Ortsverschiebung ist

$$\Delta x = -\frac{1}{2} \frac{d\phi(k_I)}{dk_I} = a \quad , \quad (4.8)$$

was dem Ort der Potentialstufe entspricht.

4.2 Konstruktion der quantenreflektierten Welle

Die physikalische Vorstellung, die der Quantenreflexion zugrunde liegt, ist, daß ein Teilchen, aus dem klassischen Außenbereich des Potentials kommend, an der Quantenregion quantenreflektiert wird und in den klassischen Außenbereich zurückläuft. Man kann eine Reflexionsamplitude berechnen, indem man die exakte Lösung der Wellenfunktion mit einer WKB-Wellenfunktion

vergleicht. Die aus dem Vergleich zwischen exakter Wellenfunktion und WKB-Wellenfunktion berechenbare, [8], Reflexionsamplitude R_l stammt allerdings aus dem klassischen Innenbereich, der links von der Quantenregion liegt, siehe Abbildung (4.1). Für die Berechnung der Reflexionswahrscheinlichkeit ist dies unerheblich, sagt doch das *Reziprozitätstheorem*, daß die Reflexionswahrscheinlichkeit links von einer Barriere gleich der Reflexionswahrscheinlichkeit rechts derselben Barriere ist. Für die Phase der Reflexionsamplitude, die uns in dieser Arbeit interessiert, gilt dies jedoch nicht, die Phase ist immer richtungsabhängig. Um also die korrekte Phase einer nach rechts auslaufenden Welle zu bestimmen, muß aus der linksseitigen Reflexionsamplitude die rechtsseitige Reflexionsamplitude bestimmt werden. Dazu benutzen wir, daß zu jeder WKB-Wellenfunktion im klassischen Innenbereich eine ebene Welle im klassischen Außenbereich gehört:

$$\begin{aligned} C_1\psi^{(+)}(z) + C_2\psi^{(-)}(z) &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{\hbar k}} \exp[ikz] \quad , \\ C_1^*\psi^{(-)}(z) + C_2^*\psi^{(+)}(z) &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{\hbar k}} \exp[-ikz] \quad , \end{aligned} \quad (4.9)$$

wobei $\psi^{(\pm)}(z) = \frac{1}{\sqrt{p(z)}} \exp\left[\pm i \int_{z_m}^z p(z') dz'\right]$. Die Wellenfunktionen im Innen- und Außenbereich des Potentials werden nun so addiert, daß im Außenbereich eine auslaufende, ebene Welle entsteht:

$$\begin{aligned} (C_1^* + R_r(k)C_2)\psi^{(-)}(z) + (C_2^* + R_r(k)C_1)\psi^{(+)}(z) \\ \rightarrow \exp[-ikz] + R_r(k) \exp[ikz] \quad . \end{aligned} \quad (4.10)$$

Um eine resultierende auslaufende (rechtslaufende) Welle zu garantieren, muß zusätzlich folgende Bedingung erfüllt sein

$$\begin{aligned} (C_2^* + R_r(k)C_1)\psi^{(+)} &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{\hbar k}} R_r(k) \exp[ikz] \quad , \\ C_1^* + R_r(k)C_2 = 0 &\Rightarrow R_r(k) = -\frac{C_1^*}{C_2} \quad . \end{aligned} \quad (4.11)$$

Der Reflexionskoeffizient der linkslaufenden Welle ist einfacher zu finden und ist schlicht

$$R_l(k) = \frac{C_2}{C_1} \quad . \quad (4.12)$$

Eine Beziehung zwischen linkem und rechtem Reflexionskoeffizient kann hergestellt werden, wenn man die Wellenfunktion im Kopplungspunkt betrachtet. Es gilt

$$\Psi(z_m) = C_1 + C_2 \quad , \quad (4.13)$$

und daraus folgen Ausdrücke für C_1 und C_2

$$C_1 = \frac{R_l(k)\Psi(z_m)}{1 + R_l(k)}, C_2 = \frac{\Psi(z_m)}{1 + R_l(k)} \quad . \quad (4.14)$$

Setzt man dies in den Ausdruck für $R_r(k)$ ein, so folgt

$$R_r(k) = -\frac{C_1^{(*)}}{C_2} = -R_l^*(k) \frac{1 + R_l(k)}{1 + R_l^*(k)} \frac{\Psi^*(z_m)}{\Psi(z_m)} \quad . \quad (4.15)$$

Der zweite Faktor trägt das Verhältnis von einlaufender und auslaufender Wellenfunktion in Abhängigkeit vom Kopplungspunkt. Dieses Verhältnis macht die Phase der Reflexionsamplitude unabhängig vom Kopplungspunkt. Durch Bildung des Absolutbetrages auf beiden Seiten weist man leicht nach, daß

$$|R_r(k)|^2 = |R_l(k)|^2 \quad , \quad (4.16)$$

also das Reziprozitätstheorem erfüllt ist, wie es sein muß. Mit dieser Methode wurden die Phasen der Reflexionsamplitude einer nach rechts auslaufenden Welle $\phi_r(k) = \arg(R_r(k))$ im anwendungsbezogenen Teil berechnet.

4.2.1 Universelles Schwellenverhalten der Quantenreflexion

Die Quantenreflexion zeigt für Potentiale, die schneller als $-1/z^2$ abfallen, und zu denen auch die von uns betrachteten atomaren Potentiale zählen, ein universelles Verhalten an der Potentialschwelle.

Die Schrödingergleichung an der Schwelle verfügt als Differentialgleichung zweiter Ordnung über zwei linear unabhängige Lösungen, $\lim_{z \rightarrow \infty} \psi_0 \sim 1$ und $\lim_{z \rightarrow \infty} \psi_1 \sim z$ die, aufgrund alles vorher Gesagten, als WKB-Wellenfunktionen geschrieben werden können,

$$\psi_\mu(z) = \frac{D_\mu}{\sqrt{p_0(z)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_z^\infty p_0(z') dz' - \frac{\phi_\mu}{2} \right], \quad \mu = 0, 1 \quad . \quad (4.17)$$

Dabei ist $p_0(z)$ der klassische Impuls an der Potentialschwelle, und die Reflexionsphase ϕ_μ stellt sicher, daß sich die WKB-Wellenfunktion im gesamten Raum wie die exakte Lösung der Schrödingergleichung an der Potentialschwelle verhält. Aus diesen beiden linear unabhängigen Lösungen kann nun eine von rechts einlaufende Welle konstruiert werden, indem man zuerst nach den Sinus- und Kosinus-Anteilen auflöst

$$\begin{aligned} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_z^\infty p_0(z') dz' \right] &= \frac{\sqrt{p_0(z)}}{\tan[\phi_0/2] - \tan[\phi_1/2]} \\ &\quad \times \left(\frac{\psi_0(z)}{D_0 \cos[\phi_0/2]} - \frac{\psi_1(z)}{D_1 \cos[\phi_1/2]} \right) , \\ \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_z^\infty p_0(z') dz' \right] &= \frac{\sqrt{p_0(z)}}{\cot[\phi_0/2] - \cot[\phi_1/2]} \\ &\quad \times \left(\frac{\psi_0(z)}{D_0 \sin[\phi_0/2]} - \frac{\psi_1(z)}{D_1 \sin[\phi_1/2]} \right) . \end{aligned} \quad (4.18)$$

Eine von rechts einlaufende Welle kann somit geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \Psi(z) &= \frac{1}{\sqrt{p_0(z)}} \left(\cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_\infty^z p_0(z') dz' \right] - i \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_\infty^z p_0(z') dz' \right] \right) , \\ &= \frac{D_0 \psi_0(z) \exp[i\phi_0/2] - D_1 \psi_1(z) \exp[i\phi_1/2]}{D_0 D_1 \sin[(\phi_0 - \phi_1)/2]} . \end{aligned} \quad (4.19)$$

Andererseits ist die asymptotische Form der Wellenfunktion an der Schwelle gegeben durch

$$\begin{aligned} \lim_{kz \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\hbar k}} (\exp[ikz] + R_r(k) \exp[ikz]) \\ \sim 1 + R_r(k) - ikz(1 - R_r(k)) . \end{aligned} \quad (4.20)$$

Der Grenzwert ist dabei so zu verstehen, daß der Wellenvektor k schneller gegen Null strebt, als die Ortskoordinate z nach Unendlich. Die so erhaltene asymptotische Lösung an der Schwelle ist erster Ordnung in k und erfüllt die Schrödingergleichung, weil diese erster Ordnung Energie, also zweiter Ordnung im Wellenvektor ist. Ein Vergleich der beiden Schwellenlösungen liefert

$$\lim_{k \rightarrow 0} R_r(k) \sim - \frac{1 - ik \exp[-i(\phi_0 - \phi_1)/2] D_1/D_0}{1 + ik \exp[-i(\phi_0 - \phi_1)/2] D_1/D_0} , \quad (4.21)$$

das Schwellengesetz der Reflexionsamplitude, ausgedrückt mit Hilfe der WKB-Parameter. Die analytischen Schwellengesetze der Quantenreflexion folgen

daraus zu

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow 0} |R_r(k)| &\sim 1 - 2bk = \exp[-2bk] + \mathcal{O}(k^2), \quad b = \frac{D_1}{D_0} \sin \left[\frac{\phi_0 - \phi_1}{2} \right], \\ \lim_{k \rightarrow 0} \arg(R_r(k)) &= \lim_{k \rightarrow 0} \phi_r(k) \sim \pi - 2\bar{a}_0 k, \quad \bar{a}_0 = \frac{b}{\tan[(\phi_0 - \phi_1)/2]}. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Die Schwellenparameter b, \bar{a}_0 heißen *Schwellenlänge* und *mittlere Streulänge*. Sie tragen die benötigten Informationen über das Potential. Ein Vergleich mit (4.5, 4.7) zeigt, daß die analytischen Schwellengesetze mit denen des Stufenpotentials übereinstimmen. Dieses Ergebnis ist von nicht zu unterschätzender Wichtigkeit, sagt es doch, daß sich der Niederenergiebereich von glatten, atomaren Potentialschwänzen für die Quantenreflexion wie die einfache Potentialstufe verhält. Diese bemerkenswerte Analogie erlaubt es, gerade im physikalisch hochinteressanten Niederenergiebereich Probleme mit komplizierten Potentialverläufen auf das einfache Stufenpotential abzubilden. Benutzt man die Analogie zur Potentialstufe, so erschließen sich auch die Namen der Schwellenparameter. Die Schwellenlänge $b \leftrightarrow 1/K_0$ beschreibt die für die Quantenreflexion wirksame Potentialstärke K_0^2 . Diese ist auch im Falle singulärer, atomarer Potentiale endlich. Die mittlere Streulänge \bar{a}_0 beschreibt im Mittel den Raumbereich, in dem das Potential wirksam ist. Sie hängt nur vom langreichweitigen, attraktiven Potentialschwanz ab. Dies ist für die Quantenreflexion wesentlich, weil diese ja in der Quantenregion geschieht.

4.3 Kinematische Deutung der Phase

Die Phase der Reflexionsamplitude steht in Verbindung mit der Eisenbud-Wigner-Zeitverschiebung [42], die ihre kinematische Bedeutung erklärt. Dazu betrachtet man statt einer monochromatischen Welle ein Wellenpaket, was experimentellen Gegebenheiten am besten Rechnung trägt,

$$\begin{aligned} \Psi(z, t) = \int dE C(E) \left\{ \exp \left[-i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} z - i\omega(E)t \right] \right. \\ \left. + |R_r(E)| \exp \left[i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} z - i\omega(E)t + i\phi(E) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Dabei ist $C(E)$ die Gewichtsfunktion des Wellenpaketes und $\omega(E)$ seine Dispersion. Unter der Annahme, die Gewichtsfunktion sei um einen Energiewert E_0 stark lokalisiert, kann der Einfluß von $\phi(E)$ auf den reflektierten Teil des Wellenpaketes mit der Methode der stationären Phase untersucht werden, weil außer der Energie E_0 selbst nurmehr kleine Abweichungen von dieser Energie beitragen können. Um das erfüllen zu können, muß die Phase des Wellenpaketes um E_0 extremal sein. Für den reflektierten Anteil finden wir

$$\begin{aligned} \left. \frac{z}{v_0} - \hbar \frac{\partial \omega(E)}{\partial E} \right|_{E=E_0} &= \left. t = - \hbar \frac{\partial \phi(E)}{\partial E} \right|_{E=E_0} \\ t - t' = \Delta t &= - \hbar \frac{\partial \phi(E)}{\partial E} \Big|_{E=E_0} . \end{aligned} \quad (4.24)$$

Formel (4.24) besagt, daß die Ableitung der Phase $\phi(E)$ am Punkt E_0 genau den Zeitunterschied mißt, um den sich die Bewegung in einem Potential von der entsprechenden freien Bewegung mit der Geschwindigkeit v_0 unterscheidet. Die Ortsverschiebung, die das Wellenpaket durch die Quantenreflexion erfährt, folgt daraus zu

$$\begin{aligned} \Delta t &= - \hbar \frac{\partial \phi(E)}{\partial E} \Big|_{E=\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}} = \frac{2\Delta r}{v_0} = - \frac{m}{\hbar k_0} \frac{\partial \phi(k)}{\partial k} \Big|_{k=k_0} \\ \Rightarrow \Delta r &= - \frac{1}{2} \frac{\partial \phi(k)}{\partial k} \Big|_{k=k_0} . \end{aligned} \quad (4.25)$$

Der Faktor $1/2$ rührt vom zweimaligen Durchlaufen des Weges Δr , während des Einfalls zum ersten Mal, nach der Reflexion zum zweiten Mal, her.

Die entsprechende, klassische Zeitverschiebung ist gegeben zu

$$\begin{aligned} \Delta t_{\text{kl}} &= 2 \lim_{z \rightarrow \infty} \int_0^z \left(\frac{1}{v_0} - \frac{1}{v(z')} \right) dz' \\ &= 2m \int_0^\infty \left(\frac{1}{\hbar k_0} - \frac{1}{p(z')} \right) dz' . \end{aligned} \quad (4.26)$$

Sie mißt ebenfalls den Unterschied zwischen einer freien Bewegung und einer Bewegung im Potential. Im zweiten Teil dieser Arbeit wird der Vergleich zwischen beiden Zeitverschiebungen interessante Einblicke in die Unterschiedlichkeit von quantenmechanischer und klassischer Bewegung liefern.

Teil II

Die Kinematik der Quantenreflexion

Kapitel 5

Einfache atomare Potentiale

In diesem Kapitel untersuchen wir die Phase der Reflexionsamplitude für einfache, atomare Potentialschwänze vom Typ

$$U(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\beta_\alpha^{\alpha-2}}{r^\alpha} \quad \alpha > 2 \quad . \quad (5.1)$$

Potentiale dieses Typs findet man in der Natur als van der Waals-Potential ($\alpha = 3$) zwischen einem polarisierbaren Teilchen und einer Wand; als Casimir-Polder-Potential, den retardierten Anteil der Atom-Oberflächen-Wechselwirkung, oder als Wechselwirkung zwischen einem neutralen und einem geladenen Teilchen ($\alpha = 4$); als van der Waals-Potential zwischen zwei neutralen, polarisierbaren Teilchen ($\alpha = 6$); als Casimir-Polder-Potential zwischen zwei neutralen, polarisierbaren Teilchen ($\alpha = 7$).

Soweit nicht auf andere Literatur verwiesen wird, behandelt dieses Kapitel die Ergebnisse von [15].

5.1 Verhalten von Wellenpaketen

Die Schrödingergleichung, die in diesem Kapitel betrachtet und gelöst wird, lautet

$$\Psi''(r) + \left(k^2 + \frac{\beta_\alpha^{\alpha-2}}{r^\alpha} \right) \Psi(r) = 0, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}} \quad . \quad (5.2)$$

Wie in Kapitel 4 bereits gezeigt wurde, beschreibt diese Schrödingergleichung das Verhalten eines Teilchens, das scharf um eine Energie $E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} k_0^2$ lokalisiert ist. Das Teilchen kann dabei als einzelnes Atom oder ein atomares

Wellenpaket interpretiert werden.

Mit Hilfe der Skalierung $x = r/\beta_\alpha$ können wir die Schrödingergleichung auf Normalform transformieren und uns die Homogenitätseigenschaften der einfachen, atomaren Potentiale zunutze machen. Wir finden

$$\Psi''(x) + \left((k\beta_\alpha)^2 + \frac{1}{x^\alpha} \right) \Psi(x) = 0 \quad . \quad (5.3)$$

Die Schrödingergleichung in Normalform hängt nurmehr von dem Produkt $\kappa = k\beta_\alpha$ ab, einer dimensionslosen Impulsskala, deren Benutzung die hauptsächlich numerischen Untersuchungen im folgenden sehr vereinfachen wird.

5.1.1 Phase, Orts- und Zeitverschiebung

Ein scharf lokalisiertes Wellenpaket wird durch die Quantenreflexion seine Form nicht verändern. Daher beschreibt die Phase der Reflexionsamplitude exakt die Kinematik der Quantenreflexion durch die aus der Phase berechenbaren Orts- und Zeitverschiebungen. Bevor wir uns der allgemeinen, numerischen Lösung von (5.3) zuwenden, diskutieren wir die analytisch erhältlichen Schwellenlösungen. Um den Textfluß nicht zu unterbrechen, haben wir die genaue Berechnung der analytischen Schwellengesetze in den Anhang gestellt. Hier folgt lediglich die Darstellung der Ergebnisse. Die allgemeine Form des Schwellengesetzes der Phase lautet

$$\lim_{k \rightarrow 0} \phi(k) \sim \pi - 2\bar{a}k, \quad \bar{a} = \frac{b}{\tan \left[\frac{\pi}{\alpha-2} \right]} \quad , \quad (5.4)$$

wobei b die Schwellenlänge des Potentials ist,

$$b = \beta_\alpha \sin \left[\frac{\pi}{\alpha-2} \right] \left(\frac{1}{\alpha-2} \right)^{\frac{2}{\alpha-2}} \frac{\Gamma \left[1 - \frac{1}{\alpha-2} \right]}{\Gamma \left[1 + \frac{1}{\alpha-2} \right]} \quad . \quad (5.5)$$

Nach (5.4) ist die mittlere Streulänge für $\alpha = 3$ nicht definiert, für $\alpha = 4$ gleich Null und für alle höheren Potenzen von α endlich. Die Potenzen $\alpha = (3, 4)$ stellen also Sonderfälle dar, die eine gesonderte Behandlung benötigen, siehe Anhang. Für $\alpha = 3$ findet man

$$\lim_{k \rightarrow 0} \phi(k) \sim \pi - 2(k\beta_3) \ln[k\beta_3] \quad , \quad (5.6)$$

und daraus erhält man die Orts- und Zeitverschiebung an der Schwelle zu

$$\lim_{k_0 \rightarrow 0} \Delta r \sim \beta_3 \ln[k_0 \beta_3] \quad , \quad \lim_{k_0 \rightarrow 0} \Delta t \sim \frac{2m}{\hbar k_0} \beta_3 \ln[k_0 \beta_3] \quad . \quad (5.7)$$

Das logarithmische Verhalten macht die Ortsverschiebung für kleine k_0 stark negativ und führt letztendlich darauf, daß keine mittlere Streulänge definiert werden kann, so wie es in der Literatur bereits bekannt ist. Die Zeitverschiebung wird an der Schwelle ebenfalls stark negativ. Das bedeutet, daß die quantenmechanische Bewegung sehr viel langsamer verläuft als die äquivalente, freie Bewegung.

Das Schwellengesetz für $\alpha = 4$ lautet

$$\lim_{k \rightarrow 0} \phi(k) \sim \pi - \frac{2\pi}{3} (k\beta_4)^2 \quad , \quad (5.8)$$

und Orts- und Zeitverschiebung folgen daraus zu

$$\lim_{k_0 \rightarrow 0} \Delta r \sim \frac{2\pi}{3} \beta_4 (k_0 \beta_4) \quad , \quad \lim_{k_0 \rightarrow 0} \Delta t \sim \frac{4\pi}{3} \frac{m\beta_4^2}{\hbar} \quad . \quad (5.9)$$

Da die mittlere Streulänge im Falle $\alpha = 4$ gleich Null ist, geht das Schwellengesetz quadratisch in $k\beta_4$. Das Verschwinden der mittleren Streulänge bedeutet kinematisch, daß die quantenmechanische Bewegung sich an der Schwelle nicht von einer freien Bewegung unterscheidet. Die Zeitverschiebung an der Schwelle ist positiv, es liegt also ein Zeitgewinn der quantenmechanischen Bewegung im Vergleich zur freien Bewegung vor, und endlich. Diese Fälle $\alpha = (3, 4)$ sind zugleich die interessantesten. Für alle höheren Potenzen α ergibt sich immer eine endliche und positive mittlere Streulänge, die dann eine positive Zeitverschiebung bedeutet. Die Abbildungen (5.1) und (5.2) zeigen die numerisch bestimmten Kurven für Phasen und Ortsverschiebung in gutem Einklang mit den analytisch bestimmten Schwellengesetzen. Für $\alpha = 3$ ist in Schwellennähe deutlich ein Maximum zu erkennen, das wir van der Waals-Maximum genannt haben, weil sich dieses Verhalten von den anderen Potenzen so deutlich unterscheidet. Das Maximum gibt das logarithmische Verhalten in Schwellennähe wieder und führt in der Ortsverschiebung zu einer stark negativen Tendenz. Für $\alpha = 4$ sieht man deutlich das parabolische Extremum der Phase und die damit einhergehende, verschwindende Ortsverschiebung. Alle höheren Potenzen zeigen deutlich lineares Schwellenverhalten und positive, endliche Ortsverschiebungen. Daß die Orts- und Zeitverschie-

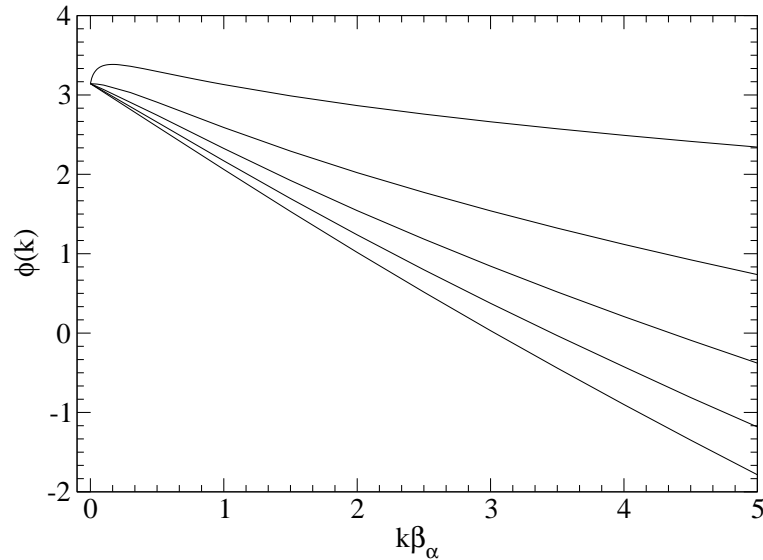


Abbildung 5.1: Numerisch berechnete Phasen der Reflexionsamplitude als Funktion von $k\beta_\alpha$. Die Potenz α läuft von oben nach unten für $\alpha = 3, 4, 5, 6$ und 7 .

bungen immer den Unterschied zwischen einer quantenmechanischen Bewegung im Potential und einer freien Bewegung messen, ist insbesondere wichtig für Situationen, in denen ein Atom auf eine Oberfläche einfällt. Solange das Atom-Oberflächen-Potential für alle Richtungen parallel zur Oberfläche translationsinvariant ist, bleiben alle parallelen Impulskomponenten erhalten. Die zur Oberfläche senkrechte Impulskomponente unterliegt zwar dem Einfluß des Potentials, aber das Potential bewirkt lediglich eine Richtungs-umkehr der senkrechten Impulskomponente nach der Reflexion am Ort Δr , ihr Betrag bleibt erhalten. Die Ergebnisse sprechen dafür, daß ein Atomstrahl sich scheinbar auf geraden Trajektorien bewegt. Der Einfluß des Potentials beschränkt sich auf die spekulare Quantenreflexion des Atomstrahls an einer Reflexionsebene, die um Δr von der tatsächlichen Oberfläche verschoben ist. Es handelt sich dabei allerdings um eine *scheinbare* Reflexionsebene, denn ein Atom oder ein Atomstrahl wird natürlich an der Quantenregion des Potentials reflektiert. In diesem Zusammenhang möchten wir an den Goos-Hänchen-Effekt [22] erinnern, der ähnliche Vorhersagen für Lichtwellen macht und erst kürzlich experimentell bestätigt wurde [7]. Der Goos-

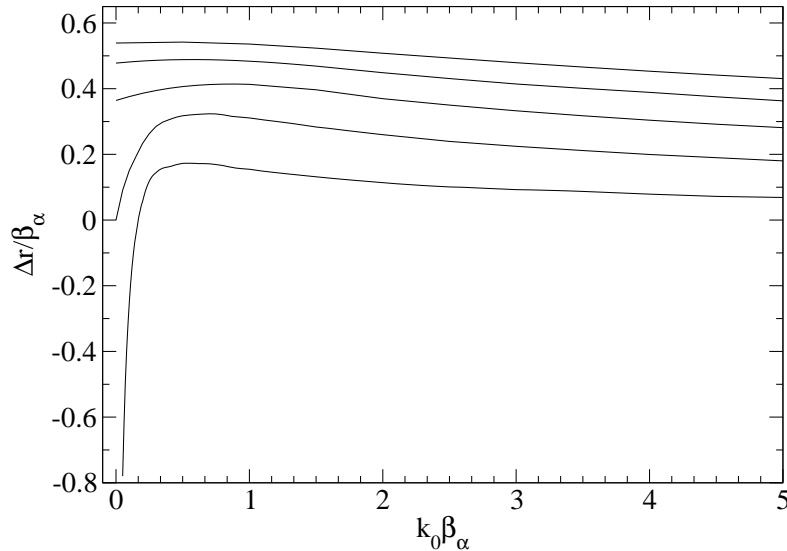


Abbildung 5.2: Numerisch bestimmte Ortsverschiebung als Funktion von $k_0\beta_\alpha$. Die Potenz α läuft von unten nach oben für $\alpha = 3, 4, 5, 6$ und 7 .

Hänchen-Effekt sagt für Lichtwellen, die in eine klassisch verbotene Region eindringen, eine negative Zeitverschiebung, also eine Zeitverzögerung, voraus, so daß es scheint, als werde die Lichtwelle an einer Ebene hinter der Oberfläche reflektiert. Diese Analogie zwischen Photonen und Atomen beschränkt sich allerdings auf ihr scheinbares Verhalten, denn ein Atom, das sich in einem singulären atomaren Potential bewegt, kann nicht auf die andere Seite der Singularität gelangen, während das Licht im klassisch verbotenen Bereich aufgrund des Brechungsindex des Materials eine gekrümmte Bahn beschreibt und räumlich verschoben wieder austritt.

5.1.2 Hochenergieverhalten

Um das Hochenergieverhalten der Phase der Reflexionsamplitude zu untersuchen, können wir den störungstheoretischen Zugang von [36] anwenden. Darin wurde folgender Ausdruck für die Reflexionsamplitude gefunden

$$\lim_{k \rightarrow \infty} R_r(k) \sim -i \exp \left[i2 \int^{r_u} p(r) dr \right] . \quad (5.10)$$

Dabei ist r_u der komplexe, klassische Umkehrpunkt. Bringt man diesen

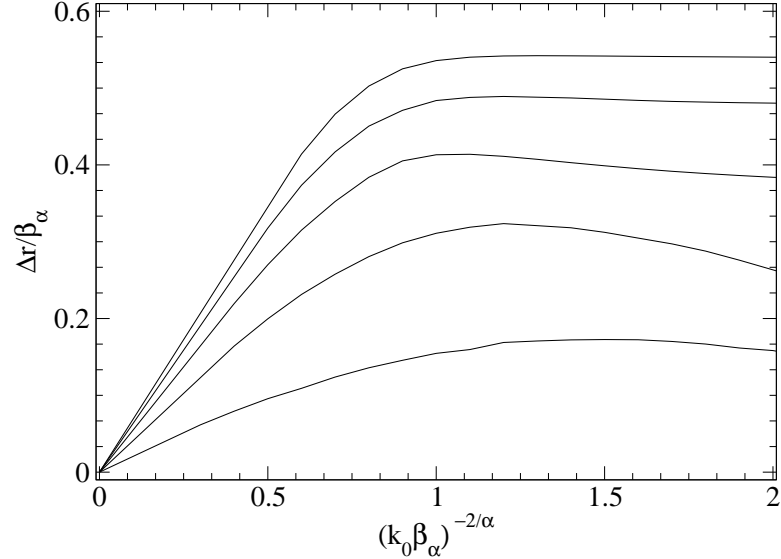


Abbildung 5.3: Hochenergieasymptotik der Ortsverschiebung. Die Potenz α läuft von unten nach oben für $\alpha = 3, 4, 5, 6$ und 7 .

Ausdruck auf skaleninvariante Form, so findet man

$$\lim_{k \rightarrow \infty} R_r(k) \sim -i \exp \left[i 2 (k \beta_\alpha)^{1 - \frac{2}{\alpha}} \int^{y_u} \sqrt{1 + \frac{1}{y^\alpha}} dy \right] . \quad (5.11)$$

Der komplexe, klassische Umkehrpunkt ist jetzt gegeben durch $y_u = \exp \left[i \frac{\pi}{\alpha} \right]$. Maßgeblich zur Berechnung des Absolutbetrages ist der Punkt $\alpha = 1$, der der positiven, reellen Achse zunächst liegt. Zur Bestimmung des Hochenergieverhaltens müßte nun (5.11) ausgewertet werden. Die Auswertung des Absolutbetrages erfolgte bereits in [14],

$$\lim_{k \rightarrow \infty} |R_r(k)| \sim \exp \left[-B_\alpha (k \beta_\alpha)^{1 - \frac{2}{\alpha}} \right] . \quad (5.12)$$

Die Zahlen B_α werden dabei aus den imaginären Beiträgen des Wirkungsintegrals bestimmt, weil nur diese zum Absolutbetrag und damit zur Reflexionswahrscheinlichkeit beitragen. Der Integrationsweg verläuft demgemäß immer parallel zur imaginären Achse, ohne daß man auf der reellen Achse den genauen Referenzpunkt wissen müßte. Anders verhält es sich mit dem Realteil des Integrals (5.11), der die Phase bestimmt, denn zur Bestimmung

α	3	4	5	6	7
c_α	1.273	1.69	1.87	1.94	1.98

Tabelle 5.1: Numerisch bestimmte Hochenergiekonstanten, Gln. (5.13, 5.14).

der korrekten Phase ist die Kenntnis des richtigen Referenzpunktes wesentlich. Dieser ist aber weder in [36] angegeben noch sonst bekannt. Wir behelfen uns daher mit einem Schluß, der aus Abbildung (5.3) folgt, nämlich, daß der Verlauf der Ortsverschiebung als Funktion von $(k/\beta_\alpha)^{-\frac{2}{\alpha}}$ am Ursprung, der in dieser Auftragung den Hochenergieastes markiert, linear verläuft. Daraus kann geschlossen werden, siehe [17], daß die Phase sich verhalten sollte wie

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \phi(k) \sim c - c_\alpha (k/\beta_\alpha)^{1-\frac{2}{\alpha}} \quad (5.13)$$

und somit die Ortsverschiebung sich verhält wie

$$\lim_{k_0 \rightarrow \infty} \Delta r \sim \frac{c_\alpha}{2} \left(1 - \frac{2}{\alpha}\right) (k_0/\beta_\alpha)^{-\frac{2}{\alpha}} \quad (5.14)$$

Mit Hilfe dieser Vermutung können die Konstanten c_α nun mit ausreichender Genauigkeit numerisch bestimmt werden. Sie sind in Tabelle (5.1.2) aufgelistet. Ob die Zahlen c_α für $\alpha \rightarrow \infty$ gegen einen bestimmten Wert konvergieren, wie das für die Zahlen B_α in Gleichung (5.12) der Fall ist [14], konnte allerdings nicht ermittelt werden. Dazu wäre eine analytische Behandlung des Integrals in (5.11) vonnöten, die allerdings ohne die genaue Kenntnis des Referenzpunktes nicht durchgeführt werden kann. Für $\alpha = 4$ haben wir zum Vergleich die quantenmechanische Ortsverschiebung und ihre Hochenergieasymptotik in Abbildung (5.4) aufgetragen. Man erkennt deutlich wie das asymptotische Verhalten schon etwa für $k_0/\beta_\alpha \approx 10$ einsetzt, also für Energien, die nicht allzu hoch über der Potentialschwellen liegen.

5.2 Klassische Orts- und Zeitverschiebung

Ein freies, klassisches Teilchen, das sich bis zum Ort $r = 0$ und zurück bewegt, ist langsamer als ein klassisches Teilchen, das sich auf derselben Strecke in einem attraktiven Potential bewegt und dadurch Beschleunigung erfährt. Das klassische Teilchen im attraktiven Potential verfüge dabei über die gleiche

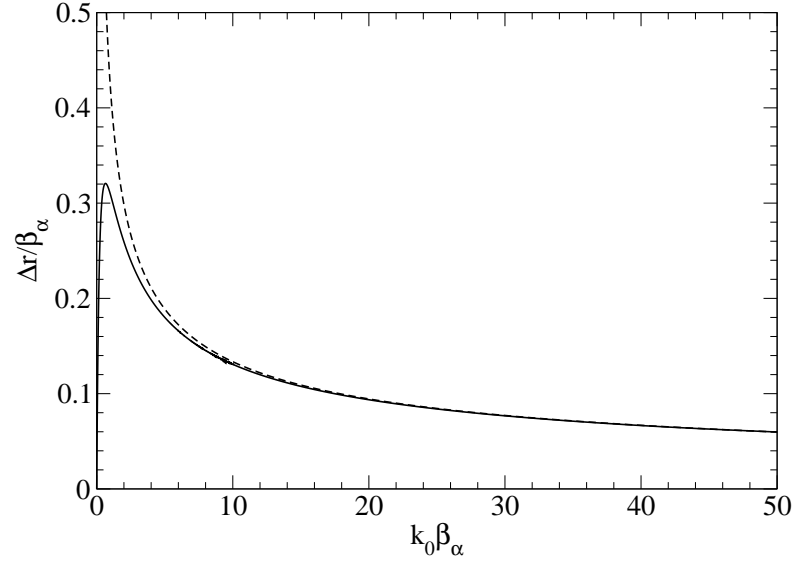


Abbildung 5.4: Vergleich zwischen quantenmechanischer Ortsverschiebung (durchgezogen) und ihrer Hochenergieasymptotik (gestrichelt). Ähnliche Graphen erhält man für alle anderen Potenzen α .

asymptotische Geschwindigkeit v_0 wie das freie Teilchen. Der Zeitgewinn des beschleunigten Teilchens ist dabei gegeben durch (4.26)

$$\begin{aligned} \Delta t_{\text{kl}} &= 2 \lim_{r \rightarrow \infty} \int_0^r \left(\frac{1}{v_0} - \frac{1}{v(r')} \right) dr' \\ &= 2m \int_0^\infty \left(\frac{1}{\hbar k_0} - \frac{1}{p(r')} \right) dr' \quad . \end{aligned} \quad (5.15)$$

Für homogene Potentiale (5.1) kann dieses Integral analytisch bestimmt werden. Man findet

$$\Delta t_{\text{kl}} = \frac{2m}{\hbar k_0} \beta_\alpha (k \beta_\alpha)^{-\frac{2}{\alpha}} \tau(\alpha) \quad , \quad (5.16)$$

wobei die Funktion $\tau(\alpha)$ nur von der Potenz des Potentials abhängt

$$\tau(\alpha) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \Gamma \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{\alpha} \right] \Gamma \left[1 - \frac{1}{\alpha} \right] \quad . \quad (5.17)$$

Daraus folgt die klassische Ortsverschiebung zu

$$\Delta r_{\text{kl}} = \beta_\alpha (k \beta_\alpha)^{-\frac{2}{\alpha}} \tau(\alpha) \quad . \quad (5.18)$$

Die klassische Ortsverschiebung beschreibt analog zur quantenmechanischen Ortsverschiebung eine scheinbare Reflexionsebene. Für schwelennahe Energien ist das Verhalten von Quantenmechanik und klassischer Physik sehr unterschiedlich, siehe Abbildung (5.5), wo das Verhalten für $\alpha = 4$ dargestellt ist. Die Ortsverschiebung des klassischen Teilchens ist positiv und tendiert zur positiven Unendlichkeit für $k_0 \rightarrow 0$, was natürlich auch einen sehr großen Zeitgewinn bedeutet. Für hohe Energien allerdings zeigen klassische Physik und Quantenmechanik ähnliches, sogar bis auf einen Koeffizienten gleiches Verhalten. Es ist sogar so, daß ein klassisches Teilchen immer schneller ist als ein quantenmechanisches. Ein klassisches Teilchen ist punktförmig und kann daher auch noch bei sehr schwelennahen Energien vom Potential voll beschleunigt werden, während ein quantenmechanisches Teilchen über eine de Broglie-Wellenlänge verfügt, die bei schwelennahen Energien sehr groß wird. Die Wellenlänge gibt in gewisser Weise die Ausdehnung des Teilchens wieder, und ein quantenmechanisches Teilchen mit schwelennaher Energie ist daher sehr weit ausgedehnt. Diese Ausdehnung führt dazu, daß es nicht mehr vollständig in das Potential hineinpaßt und daher nicht derselben Beschleunigung ausgesetzt sein kann wie das äquivalente, klassische Teilchen. Die Tatsache, daß quantenmechanisches und klassisches Verhalten im Hochenergielimes bis auf einen Koeffizienten gleich sind, ist klar, denn für hohe Energien wird für Potentiale (5.1) der klassische Grenzfall erreicht. Allerdings strebt für hohe Energien auch die Quantenreflexionswahrscheinlichkeit gegen Null.

Zum Vergleich betrachten wir noch ein klassisches Teilchen, das sich nicht bis $r = 0$ bewegt, sondern schon an der Quantenregion reflektiert wird. Dazu berechnen wir

$$\begin{aligned} \Delta t_{\text{kl}} &= 2m \int_0^{r_E} \frac{dr}{p(r)} = \frac{2m}{\hbar k_0} \beta_\alpha (k\beta_\alpha)^{-\frac{2}{\alpha}} \sigma(\alpha) \quad , \\ \sigma(\alpha) &= \left(\frac{2}{2+\alpha} \right) {}_2F_1 \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2} + \frac{1}{\alpha}, \frac{3}{2} + \frac{1}{\alpha}, -1 \right] \quad , \end{aligned} \quad (5.19)$$

woraus die Ortsverschiebung eines schon an der Quantenregion reflektierten, klassischen Teilchens folgt zu

$$\Delta r_{\text{kl}}^Q = \beta_\alpha (k\beta_\alpha)^{-\frac{2}{\alpha}} [\tau(\alpha) + \sigma(\alpha)] . \quad (5.20)$$

Von der Quantenmechanik ausgehend, würde man erwarten, daß eine vorzeitige Reflexion an der Quantenregion dem quantenmechanischen Verhalten

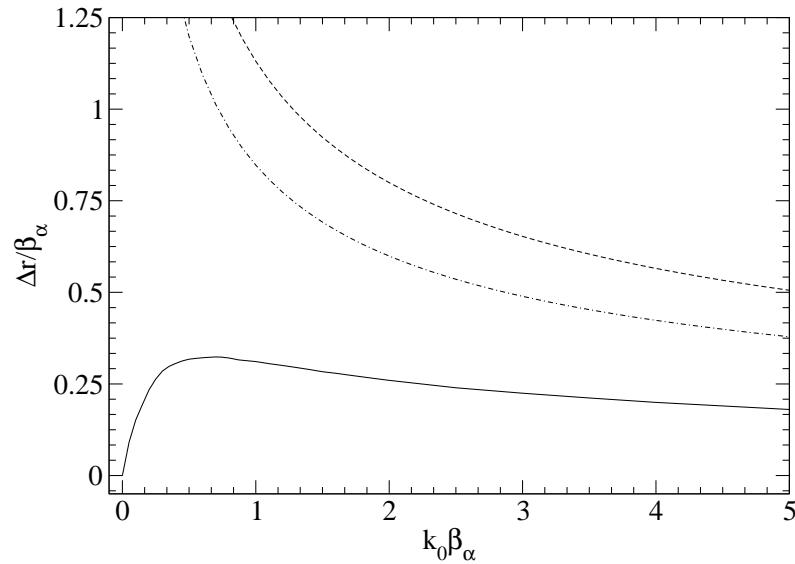


Abbildung 5.5: Vergleich zwischen quantenmechanischer Ortsverschiebung (durchgezogen) und klassisch beschleunigtem, bei $r = 0$ reflektiertem Teilchen (punkt-gestrichelt) und klassisch beschleunigtem, bei $r = r_E$ reflektierten Teilchen (gestrichelt) für $\alpha = 4$. Ähnliche Ergebnisse werden für alle Potenzen α erhalten.

näher kommt, weil das klassische Teilchen noch nicht vom singulären Innenbereich des Potentials beeinflusst ist. Wie Abbildung (5.5) allerdings zeigt, ist diese Annahme nicht korrekt, vielmehr führt eine Verkürzung des Weges zu einer noch größeren Ortsverschiebung und also zu einem noch größeren Zeitgewinn. Daraus folgt, daß das Verhalten eines quantenmechanischen Teilchens tatsächlich nur durch seine Wellennatur erklärt werden kann, die kein Pendant in klassisch-mechanistischen Vorstellungen besitzt.

Kapitel 6

Atom-Oberflächen-Potentiale

In diesem Kapitel untersuchen wir das Quantenreflexionsverhalten von Atomen, die auf eine Oberfläche einfallen. Soweit nicht auf andere Literatur verwiesen wird, werden in diesem Kapitel die Ergebnisse aus [25] dargestellt. Wie in Kapitel 3 bereits gezeigt, gehen die Casimir-van der Waals-Potentiale, die die Wechselwirkung zwischen Atom und Oberfläche vermitteln, nur in ihren asymptotischen Grenzfällen in homogene Potentialschwänze über und werden ansonsten durch komplizierte Formeln dargestellt, zu deren Auswertung das Eigenspektrum der jeweiligen Atomsorte bekannt sein muß. Da die Berechnung des Eigenspektrums bei Mehrelektronenatomen mit ganz erheblichen Schwierigkeiten verbunden ist, ist die genaue Form eines Casimir-van der Waals-Potentials nur in wenigen Ausnahmefällen bekannt. Um aber dennoch Aussagen von allgemeinem Wert über Atom-Oberflächen-Systeme machen zu können wurden in der Literatur eine Reihe von Modellpotentialen entwickelt, anhand deren wir unsere Untersuchungen vornehmen werden.

6.1 Skalierung

Für homogene Potentiale (5.1) hängt die Schrödingergleichung nicht einzeln von der Energie $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ und der Potentialstärke β_α ab, sondern nur von einer dimensionslosen Energieskala ($k\beta_\alpha$). Die Potentialstärke β_α ist dabei die intrinsische Längenskala des physikalischen Systems. Nichthomogene Potentiale verfügen über mehrere intrinsische Längenskalen, die durch geeignete Skalierung zwar in dimensionslose Skalen übergeführt werden können, aber es findet keine Skalenreduktion mehr statt. Die im folgenden dargestellte

Skalentheorie wurde in [11] für allgemeine nichthomogene Potentialschwänze entwickelt und in [14] auf Casimir-van der Waals-Potentiale angewandt. Die asymptotischen Limiten eines Casimir-van der Waals-Potentials sind gegeben zu

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow 0} V_{\text{CvdW}}(r) &\sim -\frac{C_3}{r^3} = -\frac{\hbar^2 \beta_3}{2m r^3} \quad , \\ \lim_{r \rightarrow \infty} V_{\text{CvdW}}(r) &\sim -\frac{C_4}{r^4} = -\frac{\hbar^2 \beta_4^2}{2m r^4} \quad . \end{aligned} \quad (6.1)$$

Die beiden quantenmechanischen Längenskalen sind damit durch die Potentialstärken β_3, β_4 gegeben, die sich zu einer einzigen, intrinsischen Länge kombinieren lassen,

$$l = \frac{C_4}{C_3} = \frac{\beta_4^2}{\beta_3} \quad . \quad (6.2)$$

Die intrinsische Länge l erlaubt es nun, die Ortskoordinate und die Energie dimensionslos zu schreiben, durch Einführung der Variablen

$$x = \frac{r}{l}, \quad \kappa = kl \quad . \quad (6.3)$$

Die Skalentheorie nichthomogener Potentiale erlaubt es ebenfalls und ohne Beschränkung der Allgemeinheit, über die intrinsische Länge l eine Potentialstärke K_0 zu definieren,

$$\frac{\hbar^2 K_0^2}{2m} = \frac{C_3}{l^3} = \frac{C_4}{l^4} \Rightarrow K_0 = \frac{(\beta_3)^2}{(\beta_4)^3} \quad . \quad (6.4)$$

Die allgemeine Gestalt eines Casimir-van der Waals-Potentials ist somit durch eine Skalenform

$$V_{\text{CvdW}}(r) = -\frac{\hbar^2 K_0^2}{2m} v\left(\frac{r}{l}\right) \quad (6.5)$$

gegeben, wobei $v\left(\frac{r}{l}\right)$ eine Formfunktion ist. Es ist diese Formfunktion, die durch die oben erwähnten Modellpotentiale modelliert wird.

Mit der allgemeinen Skalenform des Potentials läßt sich nun die Schrödingergleichung für die Wellenfunktion $\Psi = \Psi(x = r/l)$ auf Skalenform bringen

$$\begin{aligned} \left[\frac{d^2}{dx^2} + \kappa^2 + \rho^2 v(x) \right] \Psi(x) &= 0 \quad , \\ \rho = K_0 l &= \frac{\beta_3}{\beta_4} = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \frac{C_3}{\sqrt{C_4}} \quad . \end{aligned} \quad (6.6)$$

Der Parameter ρ ist der kritische Parameter des Systems. Wenn $\rho < 1$ ist, dominiert der $-1/r^3$ -Anteil des Potentials die Quantenreflexion, und alle Retardierungseffekte werden vernachlässigbar klein; wenn aber $\rho > 1$ ist, dominiert der $-1/r^4$ -Anteil, und die reine van der Waals-Wechselwirkung verliert an Einfluß. Bei der im nächsten Abschnitt folgenden, numerischen Auswertung wird gezeigt werden, wie gut diese einfachen Skalenargumente das tatsächliche Verhalten für die Quantenreflexion wiedergeben.

Nun sei $\rho(\infty)$ der kritische Parameter für ein Atom vor einer ideal leitenden Oberfläche. Unter Verwendung der Formeln (3.23, 3.24) kann man den kritischen Parameter auf dielektrische Oberflächen verallgemeinern

$$\rho(\epsilon) = \rho(\infty) \frac{1}{\sqrt{\Phi(\epsilon)}} \sqrt{\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1}} \quad . \quad (6.7)$$

Eine dielektrische Oberfläche verkürzt die beiden relevanten Längenskalen des Casimir-van der Waals-Potentials, Formel (3.23), und dies führt natürlicherweise auch zu einer Verkleinerung von ρ . Aus (6.7) folgen die beiden Grenzfälle

$$\lim_{\epsilon \rightarrow \infty} \rho(\epsilon) = \rho(\infty), \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 1} \rho(\epsilon) = 0 \quad . \quad (6.8)$$

Der zweite Grenzwert besagt, daß jegliche Wechselwirkung verschwindet, wenn die Oberfläche zum Isolator wird, wie es sein muß.

6.2 Verhalten von Wellenpaketen

Bevor wir nun mit der numerischen Analyse des Quantenreflexionsverhaltens für Casimir-van der Waals-Potentiale beginnen, verschaffen wir uns, versehen mit den Ergebnissen für homogene Potentiale aus dem vorangegangenen Kapitel, nochmals einen Überblick über die Kinematik des Reflexionsvorgangs. Dabei werden wir insbesondere auf die Unterschiede zwischen den beiden zum Tragen kommenden Potenzen $\alpha = (3, 4)$ eingehen.

Die Zeitentwicklung eines am Potential quantenreflektierten Wellenpaketes entspricht der Reflexion einer freien Welle am Punkt $r = \Delta r$. Der Punkt Δr markiert die Lage der scheinbaren Reflexionsebene. Wenn $\Delta r > 0$ ist, dann wird das Teilchen scheinbar vor dem Erreichen der Oberfläche reflektiert, was im Vergleich zum freien Teilchen zu einem Zeitgewinn führt. Ist aber $\Delta r < 0$, so scheint es, als ob das Teilchen erst hinter der Oberfläche reflektiert würde. Dies führt im Vergleich zum freien Teilchen, das nur bis

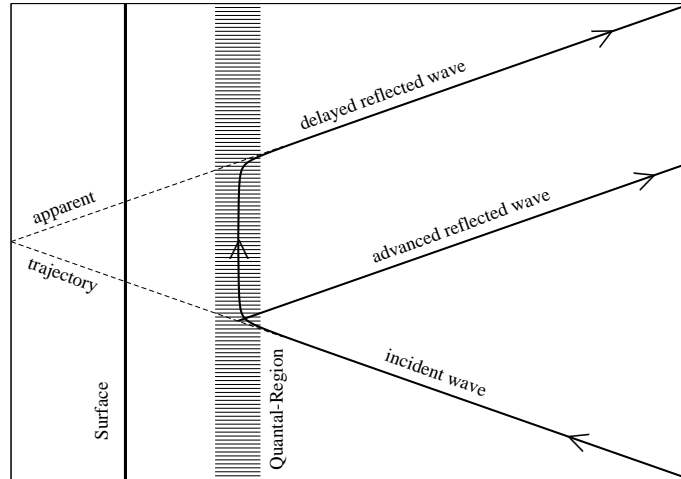


Abbildung 6.1: Schematische Darstellung des Quantenreflexionsvorgangs. Eine vorzeitig reflektierte Welle (Zeitgewinn) erscheint als vor der Oberfläche reflektiert. Dagegen erscheint eine verzögert reflektierte Welle (Zeitverlust) erst hinter der Oberfläche reflektiert zu werden. Physikalisch findet die Reflexion in der Quantenregion statt.

$r = 0$, also zur Oberfläche und zurück wandert, zu einem Zeitverlust. Die Transversalbewegung des Teilchens ist frei, wenn, wie hier und im folgenden immer angenommen, das Atom-Oberflächen-Potential translationsinvariant in diesen Richtungen ist. Die Illustration in Abbildung (6.1) stellt schematisch die extremen Unterschiede des Quantenreflexionsverhaltens zwischen $\Delta r < 0$ (delayed reflected wave in 6.1) und $\Delta r > 0$ (advanced reflected wave in 6.1) dar. Im weiteren wird nun untersucht, wie das Zusammenspiel der unterschiedlichen Potenzen in einem Casimir-van der Waals-Potential die Kinematik eines quantenreflektierten Teilchens verändern.

6.2.1 Modellpotentiale

In unseren weiteren Untersuchungen benutzen wir drei Modellpotentiale. Wir werden diese Potentiale im folgenden nur in skalierten Form angeben, da die unskalierte Form keine weiteren Einsichten in ihr Verhalten erschließen

würde.

Das von Shimizu [39] eingeführte Potential

$$V_S(x) = -\rho^2 \frac{1}{x^3(1+x)} \quad , \quad (6.9)$$

ist eine sehr einfache Verallgemeinerung der beiden Grenzfälle (6.1). Trotz seiner Einfachheit reproduziert dieses Potential experimentell gemessene Reflexionswahrscheinlichkeiten sehr gut. Mit dem entsprechenden ρ -Wert konnten in [39] die Ergebnisse für metastabiles Neon auf Silizium und Glas für kleine Energien und in [9] für Helium auf Quarz für hohe Energien hervorragend reproduziert werden. Ein weiterer Vorteil des Shimizupotentials ist die analytische Lösbarkeit der Schrödingergleichung an der Schwelle. Die genaue Herleitung der Schwellengesetze ist wiederum im Anhang zu finden. Als Schwellengesetze findet man, ausgedrückt durch Bessel- und Neumannfunktionen

$$\begin{aligned} \lim_{\kappa \rightarrow 0} \phi(\kappa) &\sim \pi + 2\kappa\rho \frac{J_0(2\rho)J_1(2\rho) + N_0(2\rho)N_1(2\rho)}{J_1^2(2\rho) + N_1^2(2\rho)} \quad , \\ \bar{a}/l &= -\rho \frac{J_0(2\rho)J_1(2\rho) + N_0(2\rho)N_1(2\rho)}{J_1^2(2\rho) + N_1^2(2\rho)} \quad . \end{aligned} \quad (6.10)$$

Die mittlere Streulänge des Shimizupotentials ist negativ, aber endlich. Dieses Ergebnis ist sehr interessant und wird sich auch bei den anderen beiden Modellpotentialen wiederfinden. Es weist sehr deutlich auf das Zusammenspiel des $-1/r^3$ -van der Waals-Anteils und des $-1/r^4$ -Casimir-Polder-Anteils hin, das mehr ist als eine bloße Überlagerung von zwei Potenzpotentialen. Der van der Waals-Anteil erzeugt eine negative Streulänge, der Casimir-Polder-Anteil macht diese endlich.

Obwohl das Shimizupotential experimentelle Meßkurven der Reflexionswahrscheinlichkeit für verschiedene Systeme einwandfrei reproduzieren kann, ist es vom theoretischen Standpunkt aus allerdings nicht ganz korrekt, weil es das Verhalten im Fernbereich nicht richtig wiedergibt. Man findet die Asymptotiken

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow 0} V_S(x) &\sim -\frac{1}{x^3} + \frac{1}{x^2} - \frac{1}{x} + \mathcal{O}(x) \quad , \\ \lim_{x \rightarrow \infty} V_S(x) &\sim -\frac{1}{x^4} + \frac{1}{x^5} - \frac{1}{x^6} + \mathcal{O}(x^{-7}) \quad . \end{aligned} \quad (6.11)$$

Das Verhalten im Nahbereich $x \rightarrow 0$ stimmt mit dem Potenzverhalten von Gleichung (3.18) überein, das Verhalten im Fernbereich, siehe Gleichung

(3.20), wird nicht korrekt reproduziert, dort müßte der zweite Term schon mit der inversen sechsten Potenz gehen.

Das zweite Modellpotential kann als Verallgemeinerung des Shimizupotentials aufgefaßt werden. Es wurde in [14] eingeführt und in [17] auf eine verbesserte Form gebracht,

$$V_{\text{RA}}(x) = -\rho^2 \frac{1 + \xi x}{x^3(1 + x + \xi x^2)}, \quad \xi = 0,31608 \quad . \quad (6.12)$$

Diese rationale Approximation wurde anhand des exakten Potentialverlaufs von Wasserstoff vor einer leitenden Oberfläche bestimmt, wie er in [30] berechnet worden ist, und gibt damit das exakte Atom-Oberflächen-Potential für Wasserstoff wieder. Damit besteht Hoffnung, auch für die dem Wasserstoff elektronisch ähnlichen Alkalimetalle einen verlässlichen Potentialverlauf gefunden zu haben. Die rationale Approximation versagt sich einer analytischen Behandlung ihres Schwellenverhaltens. Sie produziert allerdings das richtige, asymptotische Verhalten,

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow 0} V_{\text{RA}}(x) &\sim -\frac{1}{x^3} + \frac{1 - \xi}{x^2} + \frac{2\xi - 1}{x} + \mathcal{O}(x) \quad , \\ \lim_{x \rightarrow \infty} V_{\text{RA}}(x) &\sim -\frac{1}{x^4} + \frac{1}{\xi x^6} - \frac{1}{\xi^2 x^7} + \mathcal{O}(x^{-8}) \quad . \end{aligned} \quad (6.13)$$

Zuletzt verwenden wir das Feinberg-Sucher-Holstein-Potential (FSH) [12, 24]. Ursprünglich für die Wechselwirkung zwischen zwei Atomen aus quantenelektrodynamischen Rechnungen hergeleitet, wurde es in [14] für die Atom-Oberflächen-Wechselwirkung adaptiert,

$$V_{\text{FSH}}(x) = -\rho^2 \frac{2}{\pi x^3} \arctan \left[\frac{\pi}{2x} \right] \quad . \quad (6.14)$$

Eine analytische Behandlung des Schwellenverhaltens ist hier ebenfalls nicht möglich. Auch das Verhalten der Asymptotiken im Nah- und Fernbereich ist beim FSH-Potential nicht ganz so gut wie bei der rationalen Approximation,

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow 0} V_{\text{FSH}}(x) &\sim -\frac{1}{x^3} + \frac{4}{\pi^2 x^2} + \mathcal{O}(x) \quad , \\ \lim_{x \rightarrow \infty} V_{\text{FSH}}(x) &\sim -\frac{1}{x^4} + \frac{\pi^2}{12x^6} + \mathcal{O}(x^{-8}) \quad . \end{aligned} \quad (6.15)$$

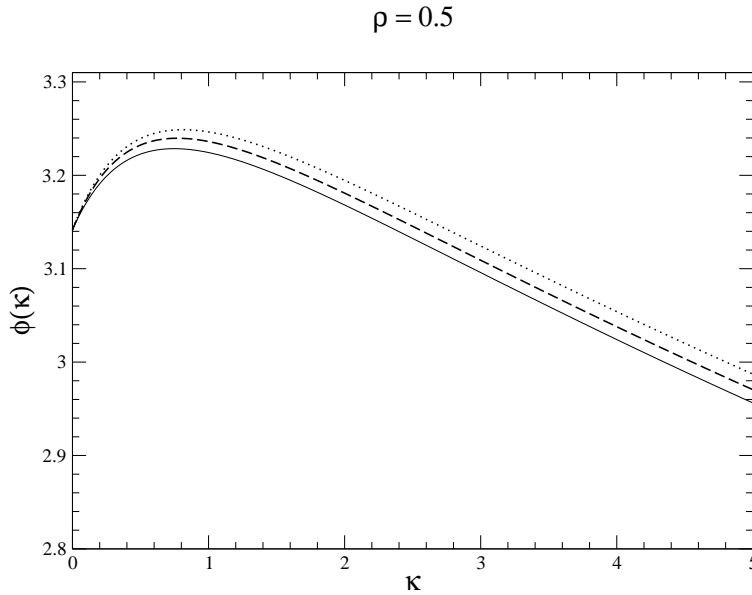


Abbildung 6.2: Phase für $\rho = 0.5$. Shimizupotential (6.9) (voll), rationale Approximation (6.12) (gestrichelt), FSH-Potential (6.14) (gepunktet).

6.2.2 Phase, Orts- und Zeitverschiebung

Die Phase der Reflexionsamplitude, die wir in diesem Abschnitt betrachten, ist in Übereinstimmung mit den Skalierungsregeln (6.3, 6.6) eine Funktion

$$\phi(k, \beta_3, \beta_4) = \phi\left(kl, \frac{\beta_3}{\beta_4}\right) = \phi(\kappa, \rho) \Big|_{\kappa=\kappa_0}. \quad (6.16)$$

Dies kann leicht gesehen werden, wenn man die Ortsverschiebung betrachtet

$$\frac{\Delta r}{l} = -\frac{1}{2} \frac{1}{l} \frac{d\phi(k, \beta_3, \beta_4)}{dk} = -\frac{1}{2} \frac{d\phi(\kappa, \rho)}{d\kappa}. \quad (6.17)$$

Jeder einzelne Wert von ρ repräsentiert viele mögliche Kombinationen von β_3, β_4 , wobei in der Natur nur wenige dieser Kombinationen realisiert sind. Wir haben die Phasen und Ortsverschiebungen für Werte von $\rho = 0.5, 1, 3$ berechnet. Dieser Parameterbereich beinhaltet die interessantesten Regionen der Wechselwirkung, nämlich $\rho < 1$, wo der $-1/r^3$ -Anteil dominant ist, $\rho > 1$, wo der $-1/r^4$ -Anteil dominant ist, und $\rho = 1$, wo beide Anteile der Wechselwirkung zu gleichen Teilen beitragen. Auch wenn im folgenden keine

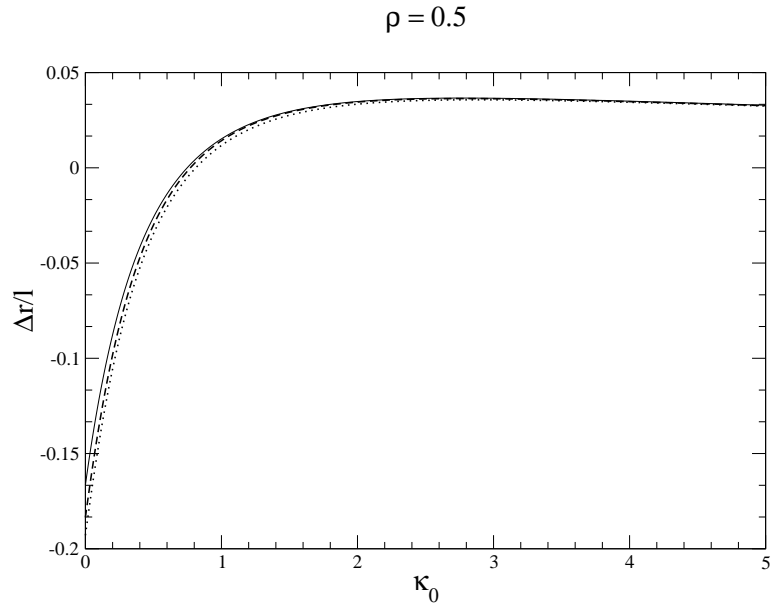


Abbildung 6.3: Ortsverschiebung für $\rho = 0.5$. Shimizupotential (6.9) (voll), rationale Approximation (6.12) (gestrichelt), FSH-Potential (6.14) (gepunktet).

Zeitverschiebungen aufgetragen werden, so werden diese doch immer diskutiert. Die Graphen der Zeitverschiebung divergieren am Ursprung immer nach der negativen Unendlichkeit, so daß daran viel weniger gesehen werden kann als bei den Ortsverschiebungen.

Die Abbildungen (6.2, 6.3) zeigen die Phasen und die Ortsverschiebungen für den Parameterwert $\rho = 0.5$. Das Verhalten der Phasen ähnelt dem in Abbildung (5.1, 5.2) für ein reines van der Waals-Potential. Deutlich ist das charakteristische, für $-1/r^3$ -Potentiale typische Maximum zu erkennen, das in Schwellennähe die Dominanz des van der Waals-Wechselwirkung erkennen läßt. Die Ortsverschiebungen sind für kleine Energien bis etwa $\kappa_0 \approx 0.8$ negativ, also erfahren quantenreflektierte Atome mit einem κ_0 , das kleiner als 0.8 ist, eine Verzögerung im Vergleich zu einem sich frei bewegenden Atom. Für ein reines $-1/r^3$ -Potential verhält sich die Ortsverschiebung an der Schwelle logarithmisch divergent (5.7). Hier aber ist zu erkennen, daß die Ortsverschiebung endlich bleibt, obwohl der van der Waals-Anteil für $\rho = 0.5$ die Wechselwirkung dominiert. Hier zeigt sich der Einfluß des $-1/r^4$ -Anteiles, der in der Asymptotik $r \rightarrow \infty$ immer vorhanden ist. Wie oben

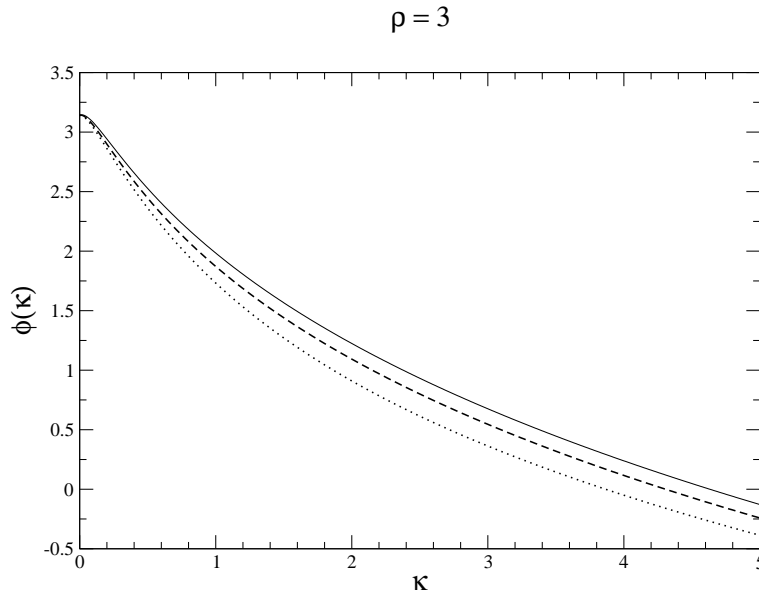


Abbildung 6.4: Phase für $\rho = 3$. Shimizupotential (6.9) (voll), rationale Approximation (6.12) (gestrichelt), FSH-Potential (6.14) (gepunktet).

bereits einmal bemerkt, ist die Casimir-van der Waals-Wechselwirkung mehr als eine einfache Überlagerung von Potenzpotentialen.

Die Abbildungen (6.4, 6.5) zeigen Phasen und Ortsverschiebungen für den Parameterwert $\rho = 3$. In diesem Bereich dominiert der $-1/r^4$ -Anteil der Wechselwirkung über einen sehr großen Energiebereich. Das charakteristische van der Waals-Maximum im schwelennahen Bereich ist hier fast gänzlich verschwunden. Die Region negativer Ortsverschiebungen findet sich nurmehr für den sehr eingeschränkten Bereich $\kappa_0 < 0.02$. Für größere Energien ähneln sowohl Phasen als auch Ortsverschiebungen in ihrer Form dem Schwellenverhalten eines reinen $-1/r^4$ -Anteils (5.9). Die Dominanz dieses Anteiles führt zu Zeitgewinnen des quantenreflektierten Atoms im Vergleich zum freien Atom. Die Tendenz zum Zeitgewinn ist am größten in unmittelbarer schwelennahem Bereich, $0.1 < \kappa_0 < 1$, wo die Ortsverschiebungen ihr Maximum haben.

Die Abbildungen (6.6, 6.7) zeigen Phasen und Ortsverschiebungen für $\rho = 1$. In diesem Parameterbereich haben beide Wechselwirkungsanteile äquivalenten Einfluß auf das Quantenreflexionsverhalten. Wieder finden wir das charakteristische van der Waals-Maximum in der Nähe der Schwelle. Es ist

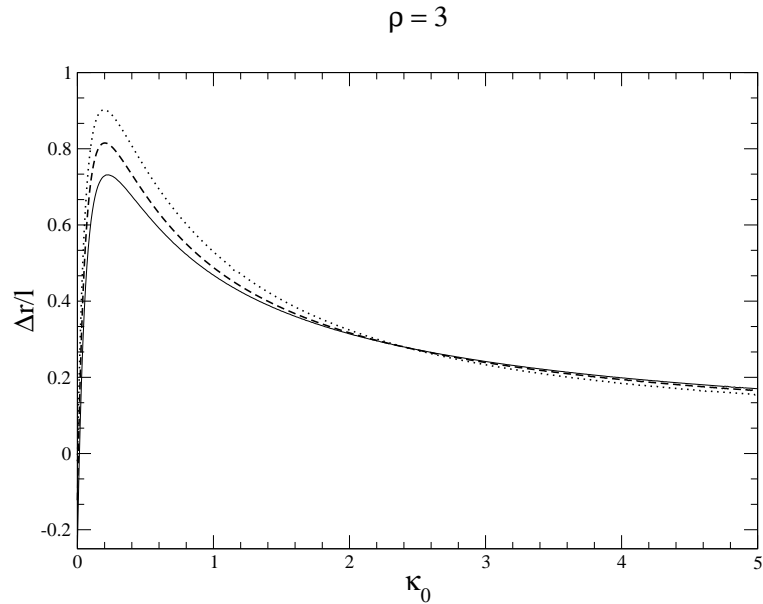


Abbildung 6.5: Ortsverschiebung für $\rho = 3$. Shimizupotential (6.9) (voll), rationale Approximation (6.12) (gestrichelt), FSH-Potential (6.14) (gepunktet).

hier allerdings schon nicht mehr so dominant wie auf den Abbildungen (6.2, 6.3) für $\rho = 0.5$. Für größere Werte von κ fallen die Phasen wesentlich schneller ab als für $\rho = 0.5$ und haben damit ebenfalls schon mehr Ähnlichkeit mit reinem $-1/r^4$ -Verhalten, was durch einen Vergleich mit Abbildung (5.1) gesehen werden kann. Betrachtet man die Ortsverschiebungen, so wird dies noch deutlicher. Die Ortsverschiebung bleibt negativ für Werte $\kappa_0 < 0.1$, und das bedeutet, daß ein Atom nurmehr sehr nahe an der Schwelle zeitverzögert quantenreflektiert wird. Hingegen liegt für $\kappa_0 > 0.1$ bereits ein Zeitgewinn im Vergleich zum freien Teilchen vor.

Die vorangegangene Diskussion der numerischen Ergebnisse hat nicht nur das Zusammenspiel der beiden Potenzen $\alpha = 3, 4$ für den Quantenreflexionsvorgang herausgearbeitet, sondern auch Indizien für die Annahme geliefert, daß die genaue Kenntnis der Formfunktion des Potentials eine eher untergeordnete Bedeutung haben könnte. Das qualitative Verhalten aller drei Modellpotentiale zeigt in den betrachteten Energiebereichen keinerlei auffällige Abweichungen voneinander, es ist nahezu identisch. Als wichtig stellt sich vielmehr der kritische Parameter ρ heraus, der ganz erheblichen Einfluß auf

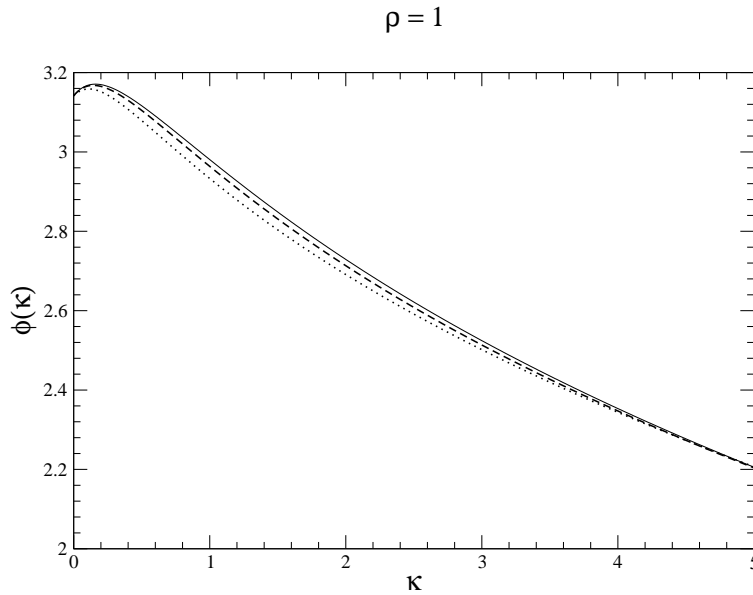


Abbildung 6.6: Phase für $\rho = 1$. Shimizupotential (6.9) (voll), rationale Approximation (6.12) (gestrichelt), FSH-Potential (6.14) (gepunktet).

die Kinematik des Reflexionsvorgangs besitzt. Der Zahlenwert von ρ entscheidet, ob ein Reflexionsvorgang für ein Atom oder ein scharf lokalisiertes atomares Wellenpaket mit einer bestimmten Energie κ_0 einer Zeitverzögerung unterliegt oder einen Zeitgewinn erfährt.

Die ausgesprochene Vermutung gilt allerdings nur für endliche Werte von κ . Bei der unten folgenden Diskussion der mittleren Streulänge als Funktion von ρ und einem Vergleich mit dem Verhalten der Schwellenlänge als Funktion von ρ wird deutlich werden, daß akkurat an der Schwelle die Kinematik der Quantenreflexion viel stärker von der Form des Potentials abhängt als die Reflexionswahrscheinlichkeit.

6.2.3 Klassische Orts- und Zeitverschiebung

Die klassische Orts- und Zeitverschiebung wird wie in Kapitel 5 mit der Formel (4.26) berechnet. Verwendet man die oben beschriebenen Skalierungsregeln (6.3, 6.6), so kann der Ausdruck für die klassische Zeitverschiebung in

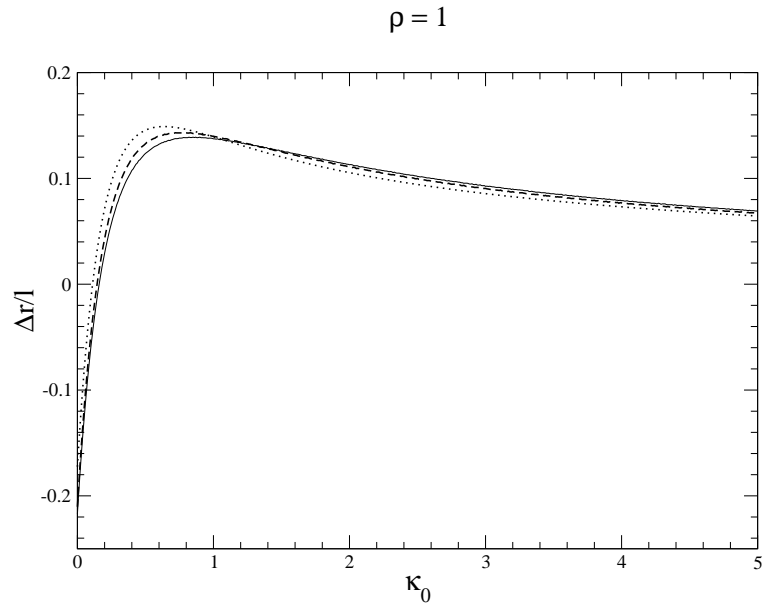


Abbildung 6.7: Ortsverschiebung für $\rho = 1$. Shimizupotential (6.9) (voll), rationale Approximation (6.12) (gestrichelt), FSH-Potential (6.14) (gepunktet).

folgende, angenehme Form gebracht werden

$$\Delta t_{\text{kl}} = \frac{2m}{\hbar k_0} l \int_0^\infty dx \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 + (\rho/\kappa_0)^2 v(x)}} \right) . \quad (6.18)$$

Dieses Integral kann leider für keines der drei Modellpotentiale analytisch bestimmt werden. Schreibt man das Integral als eine Funktion τ , dann erhält man klassische Zeit- und Ortsverschiebung zu

$$\begin{aligned} \Delta t_{\text{kl}} &= \frac{2m}{\hbar k_0} l \tau \left(\frac{\rho}{\kappa_0} \right), \quad \Rightarrow \\ \Delta x_{\text{kl}} &= \Delta r_{\text{kl}}/l = \tau \left(\frac{\rho}{\kappa_0} \right) . \end{aligned} \quad (6.19)$$

Die klassische Ortsverschiebung in Einheiten der intrinsischen Länge l ist hier eine Funktion des Verhältnisses ρ/κ_0 . Im Gegensatz dazu ist die klassische Ortsverschiebung eines homogenen Potentials durch ein einfaches Potenzgesetz gegeben, siehe Gleichung (5.18). Aber die Casimir-van der Waals-Wech-

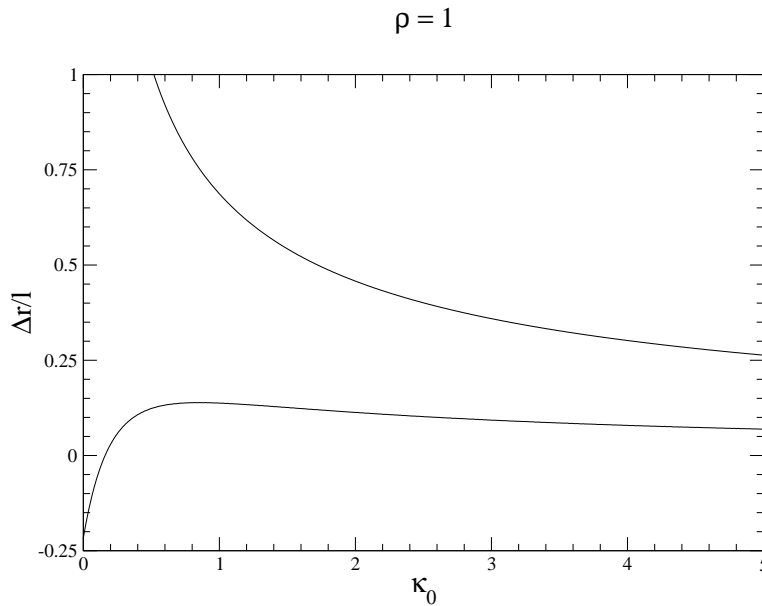


Abbildung 6.8: Vergleich zwischen quantenmechanischer Ortsverschiebung und klassischer Ortsverschiebung für das Shimizupotential (6.9).

selwirkung ist ja eine gewisse Art von Mischung der Potenzen $\alpha = (3, 4)$, so daß die klassische Ortsverschiebung nicht durch ein Potenzgesetz beschrieben werden könnte.

In Abbildung (6.8) sind die quantenmechanische und die klassische Ortsverschiebung für das Shimizupotential mit einem Wert $\rho = 1$ dargestellt. Die quantenmechanische Ortsverschiebung ist wiederum kleiner als die klassische Ortsverschiebung. Letztere divergiert an der Schwelle nach der positiven Unendlichkeit. In Schwellennähe erfährt das klassische Teilchen wiederum große Zeitgewinne, während das quantenmechanische Teilchen eine negative Ortsverschiebung erfährt, gleichbedeutend mit großen Zeitverzögerungen. Da der Bereich der Potentialschwelle auch in diesem Falle der antiklassische Limes der Schrödingergleichung ist, erwarten wir in der Tat dort auch die größten Unterschiede im Verhalten. Im Gegensatz dazu wird das Verhalten der Quantenmechanik für große Wellenzahlen κ_0 wiederum und bis auf eine Proportionalitätskonstante klassisch. Das gefundene Verhalten ist für die rationale Approximation (6.12) und das FSH-Potential (6.14) qualitativ gleich.

Allgemein bestätigt der Vergleich zwischen quantenmechanischem und klassischem Verhalten die Ergebnisse des vorangegangenen Kapitels, daß

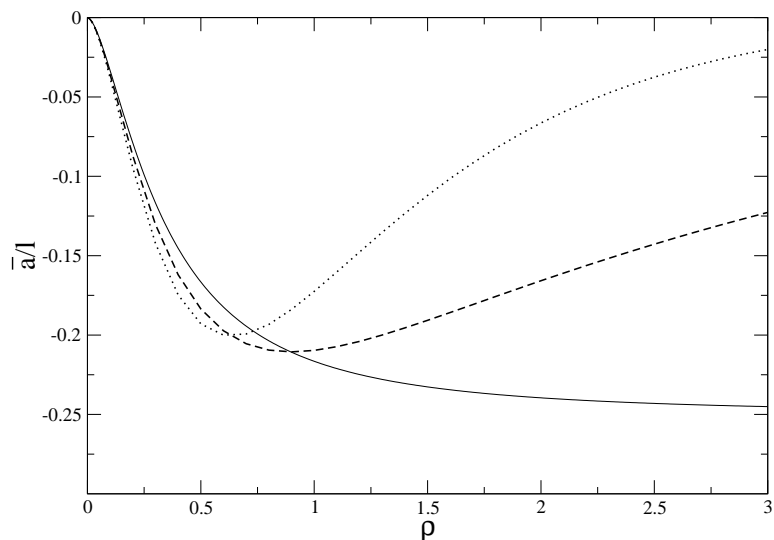


Abbildung 6.9: Mittlere Streulänge als Funktion von ρ . Shimizupotential (6.9) (voll), rationale Approximation (6.12) (gestrichelt), FSH-Potential (6.14) (gepunktet).

nämlich die quantenmechanische Ortsverschiebung immer kleiner ist als die klassische Ortsverschiebung, daß also die quantenmechanische Bewegung immer langsamer verläuft als die eines klassischen Teilchens.

6.2.4 Schwellenlänge und mittlere Streulänge

Die mittlere Streulänge ist eine sehr wichtige Größe, weil sie das Schwellenverhalten der Phase und der Ortsverschiebung bestimmt. In Abbildung (6.9) ist \bar{a}/l für unsere Modellpotentiale aufgetragen. Das Verhalten der mittleren Streulängen ist für kleine ρ qualitativ ähnlich und zeigt, daß im van der Waals-Limes der Wechselwirkung keine wesentlichen Unterschiede zwischen den Potentialen bestehen. Vom rein theoretischen Standpunkt aus wird dieses Ergebnis durch die Nahfeldentwicklungen der Potentiale (6.11, 6.13, 6.15) vorhergesagt. Unterschiede zeigen sich erst, wenn ρ ungefähr eins wird oder noch größer ist. Die mittlere, mit l skalierte Streulänge des Shimizupotentials konvergiert gegen den endlichen Wert -0.25 , während die der rationalen Approximation und des FSH-Potentials tendenziell gegen Null

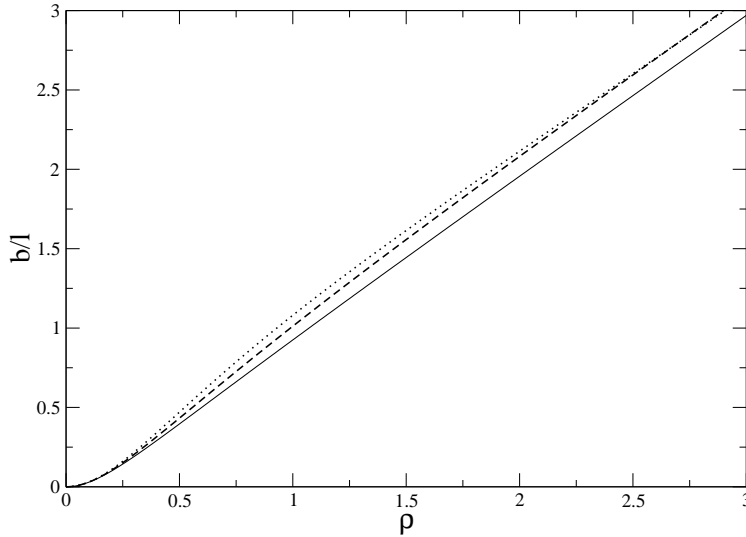


Abbildung 6.10: Schwellenlänge als Funktion von ρ . Shimizupotential (6.9) (voll), rationale Approximation (6.12) (gestrichelt), FSH-Potential (6.14) (gepunktet).

streben, wenn ρ über alle Grenzen wächst. Dieses Verhalten der mittleren Streulängen kann theoretisch ebenfalls durch die Fernfeldasymptotiken (6.11, 6.13, 6.15) verstanden werden, insbesondere das abweichende Verhalten des Shimizupotentials, das die korrekte Fernfeldasymptotik nicht reproduzieren kann. Es ist in diesem Zusammenhang sehr interessant, das Verhalten der mittleren Streulängen mit dem der Schwellenlängen b/l , Abbildung (6.10), zu vergleichen. Die Schwellenlängen aller drei Modellpotentiale verhalten sich allesamt qualitativ ähnlich über ρ . Die quantitativen Unterschiede sind ebenfalls nur sehr gering. Daraus folgt, daß das Schwellenverhalten der Phasen und damit der Quantenreflexionskinematik wesentlich empfindlicher von der Form des Potentials abhängt, als die Schwellenlänge, und damit das Schwellenverhalten der Reflexionswahrscheinlichkeit, dies tut.

In den Abbildungen (6.11, 6.12) ist die mittlere Streulänge in Einheiten von β_3, β_4 aufgetragen. Die Größe \bar{a}/β_3 strebt für $\rho \rightarrow 0$ in die negative Unendlichkeit. Dies zeigt in diesem Parameterbereich die Dominanz des $-1/r^3$ -Anteils der Wechselwirkung an. \bar{a}/β_3 geht für $\rho \rightarrow \infty$ sehr schnell gegen Null und deutet damit für diesen Parameterbereich einen schnell zurückge-

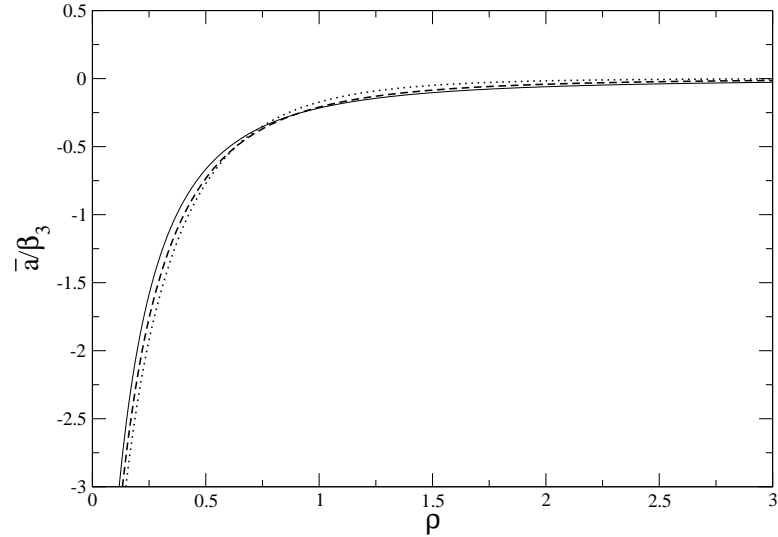


Abbildung 6.11: Mittlere Streulänge auf der β_3 -Skala. Shimizupotential (6.9) (voll), rationale Approximation (6.12) (gestrichelt), FSH-Potential (6.14) (gepunktet).

henden Einfluß des van der Waals-Anteils an und ein wachsendes Gewicht des $-1/r^4$ -Anteils. Wir weisen wiederum darauf hin, daß alle drei Modelle auf der β_3 -Skala, der van der Waals-Skala, nur marginale Unterschiede zeigen. Dies wird wiederum durch die korrekte Reproduktion der Nahfeldasymptotik verständlich. Im Gegensatz dazu zeigt die Auftragung von \bar{a}/β_4 die Unterschiede der Modellpotentiale. Wir weisen darauf hin, daß rationale Approximation und FSH-Potentials im Verhalten zueinander ähnlicher sind als zum Verhalten des Shimizupotentials. Die Größe \bar{a}/β_4 geht nach Null wenn ρ gegen Null strebt. In diesem Parameterbereich ist der $-1/r^4$ -Anteil der Wechselwirkung vernachlässigbar, was anhand der Relation

$$\frac{\bar{a}}{\beta_4} = \frac{\bar{a}}{\beta_3} \rho \quad (6.20)$$

leicht gesehen werden kann. Für wachsende ρ hingegen wächst der Einfluß des retardierten Casimir-Polder-Anteiles in dem Maße, wie der Einfluß des van der Waals-Anteils zurückgeht. Erst nach Erreichen eines Minimums strebt auch \bar{a}/β_4 gegen Null.

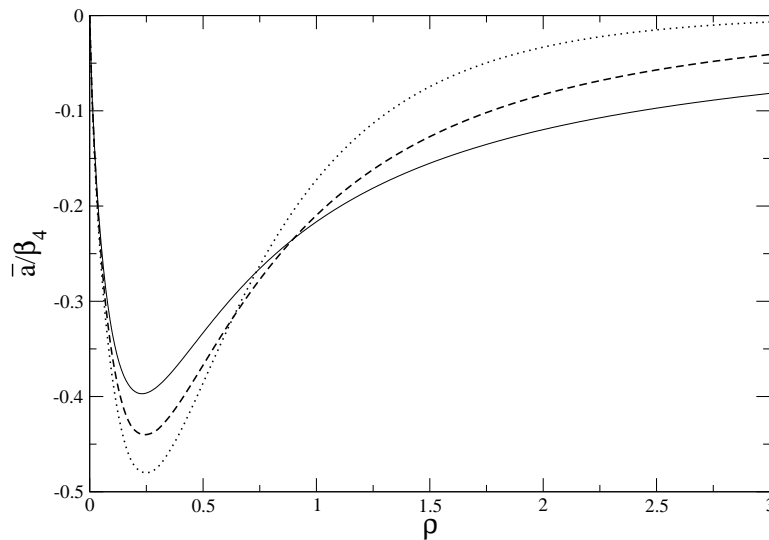


Abbildung 6.12: Mittlere Streulänge auf der β_4 -Skala. Shimizupotential (6.9) (voll), rationale Approximation (6.12) (gestrichelt), FSH-Potential (6.14) (gepunktet).

Experimentelle [39, 9] und theoretische, z. B. [23], Arbeiten über Quantenreflexionswahrscheinlichkeiten vertreten die Auffassung, der nichtretardierte van der Waals-Anteil der Wechselwirkung sei nur im Hochenergielimes von Bedeutung, weil nur in diesem Falle ein einfallendes Teilchen über genug Energie verfüge, um nahe genug an die Oberfläche zu gelangen und mit der Nahfeldasymptotik zu wechselwirken. Die vorangegangenen Untersuchungen über das Schwellenverhalten zeigen aber, daß die mittlere Streulänge für alle Werte von ρ negativ ist. Dies zeigt deutlich, daß der $-1/r^3$ -Anteil auf das Verhalten der Phase und der Ortsverschiebung auch bei schwellennahen Energien einen nicht zu vernachlässigenden Einfluß ausübt.

Kapitel 7

Metastabiler Wasserstoff

Dieses Kapitel behandelt die Quantenreflexion von metastabilem 2s-Wasserstoff an einer leitenden Oberfläche. Solange auf keinerlei andere Referenzen hingewiesen wird, handelt es sich um die Darstellung von [16].

Die Unterscheidung zwischen kleinen und großen Anständen zwischen einem Atom und einer Oberfläche bezeichnet immer den Atom-Oberflächen-Abstand z im Vergleich mit der Wellenlänge des elektrischen Dipolübergangs $\bar{\lambda}$,

$$\bar{\lambda}_{nm} = \frac{\lambda_{nm}}{2\pi} = \frac{\hbar c}{|E_m - E_n|} \quad . \quad (7.1)$$

Der 2s-Zustand von Wasserstoff ist einzigartig in seiner Entartung mit dem 2p-Zustand, so daß die Wellenlänge des entsprechenden Übergangs zwischen diesen zwei Zuständen prinzipiell unendlich ist. Natürlich hebt die Spin-Bahn-Kopplung und die Lamb-Verschiebung diese Entartung auf und spaltet den 2p-Zustand in $2p_{3/2}$ und $2p_{1/2}$ auf und führt demgemäß zu endlichen Übergangswellenlängen. Der $2p_{1/2}$ -Zustand liegt dann 0.16×10^{-6} a.u. unterhalb von 2s, und der $2p_{3/2}$ -Zustand liegt 1.51×10^{-6} a.u. oberhalb von 2s. Dies führt auf Übergangswellenlängen von $\bar{\lambda}_{3/2} \approx 10^9$ a.u. (≈ 5 cm) und $\bar{\lambda}_{1/2} \approx 10^8$ a.u. (≈ 0.5 cm). In bezug auf die Atom-Oberflächen-Wechselwirkung ist dieser Abstand so groß, daß der Einfluß der relativistischen und quantenelektrodynamischen Korrekturen in guter Näherung vernachlässigt werden kann.

Die unendliche Übergangswellenlänge zwischen den entarteten Zuständen 2s und 2p wirkt sich im Fernbereich der Atom-Oberflächen-Wechselwirkung durch eine Modifikation des Potenzverhaltens aus, weil die auf instantanem Photonenaustausch beruhende van der Waals-Wechselwirkung gerade durch

die unendliche Übergangswellenlänge immer noch möglich ist und damit auch im Fernbereich das $-1/z^3$ -Verhalten erhalten bleibt. Lediglich der van der Waals-Koeffizient C_3 ist in diesem Bereich ein anderer.

7.1 Eigenschaften von Wasserstoff

Für ein Wasserstoffatom in den sphärisch symmetrischen Zuständen $1s$ und $2s$ vor einer idealleitenden Oberfläche ist der van der Waals-Koeffizient C_3 gegeben durch Gleichung (3.19) und [4]

$$\begin{aligned} C_3(1s) &= \frac{1}{12} \langle 0, 0 | r^2 | 0, 0 \rangle = 0.25 \quad \text{a.u.}, \\ C_3^0(2s) &= \frac{1}{12} \langle 1, 0 | r^2 | 1, 0 \rangle = 3.5 \quad \text{a.u.} \quad . \end{aligned} \quad (7.2)$$

Das Superskript (0) in der zweiten Zeile von Gleichung (7.2) gibt an, daß dieser van der Waals-Koeffizient nur für kleine Abstände gültig ist. Das Potential im Fernbereich ist gegeben durch Gleichung (3.20)

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow \infty} V(z) &\approx -\frac{C_4}{z^4} \\ &+ \sum_m \theta [-(E_m - E_n)] \frac{4}{3} \frac{|\langle m | \mathbf{r} | n \rangle|^2}{\bar{\lambda}_{nm}^3} \left(\frac{\cos[x]}{2x} - \frac{\sin[x]}{x^2} - \frac{\cos[x]}{x^3} \right) \quad , \end{aligned} \quad (7.3)$$

mit $x = \frac{2z}{\bar{\lambda}_{nm}}$. Im Langwellenlimes $\bar{\lambda}_{nm} \rightarrow \infty$ wird daraus

$$\lim_{z \rightarrow \infty} V(z) \approx -\frac{C_4}{z^4} - \sum_m \theta [-(E_m - E_n)] \frac{4}{24} \frac{|\langle m | \mathbf{r} | n \rangle|^2}{z^3} \quad , \quad (7.4)$$

und da wir aufgrund der obigen Überlegungen wissen, daß in diesem Grenzfall nur noch der Übergang zwischen dem $2s$ - und dem $2p$ -Zustand beiträgt, erhält man schließlich

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow \infty} V(z) &\approx -\frac{C_4}{z^4} - \frac{1}{12} \frac{|\langle 1, 0 | \mathbf{r} | 1, 1 \rangle|^2}{z^3} \quad \Rightarrow \\ \lim_{z \rightarrow \infty} V(z) &\approx -\frac{C_4}{z^4} - \frac{C_3^\infty(2s)}{z^3} \quad , \\ C_3^\infty(2s) &= \frac{1}{12} |\langle 1, 0 | \mathbf{r} | 1, 1 \rangle|^2 = 2.25 \quad \text{a.u.} \quad . \end{aligned} \quad (7.5)$$

Das Superskript ∞ in der dritten Zeile von (7.5) gibt an, daß dieser van der Waals-Koeffizient nur im Fernbereich gilt. Gleichung (7.5) zeigt allgemein, wie die Entartung zwischen $2s$ - und $2p$ -Zustand das Potenzverhalten des Atom-Oberflächen-Potentials verändert. Die van der Waals-Wechselwirkung bleibt in führender Ordnung erhalten, während der retardierte Casimir-Polder-Anteil nahezu bedeutungslos wird. Bedenkt man, daß die Casimir-Polder-Wechselwirkung ein Resultat zweiter Ordnung Störungstheorie ist, so wird klar, warum das so sein muß: das Vakuumlichtfeld induziert eine Stark-Verschiebung in den atomaren Niveaus, und im Falle der Entartung dominiert die lineare Stark-Verschiebung über die quadratische Stark-Verschiebung.

7.2 Konstruktion des Potentials

Um ein Potential zu konstruieren, das die im vorangegangenen Abschnitt hergeleiteten Grenzfälle richtig reproduziert, orientieren wir uns an der rationalen Approximation (6.12) aus dem vorangegangenen Kapitel und [14] und setzen ebenfalls eine rationale Approximation an

$$V_{2s}(z) = -\frac{C_3^0(2s)}{z^3} \frac{1 + fz}{1 + gz} \quad (7.6)$$

Aus der Bedingung, daß (7.6) die in Gleichung (3.18) beschriebene Nahfeld-asymptotik

$$\lim_{z \rightarrow 0} V_{2s}(z) \sim -\frac{C_3^0(2s)}{z^3} + \frac{\alpha_{fs}}{4\pi z^2} \quad (7.7)$$

korrekt wiedergeben muß, erhält man folgende Beziehungen

$$\begin{aligned} f &= \frac{9}{5} \frac{\alpha_{fs}}{4\pi C_3^0(2s)} \approx 0.0002986 \quad \text{a.u.} \quad , \\ g &= \frac{14}{5} \frac{\alpha_{fs}}{4\pi C_3^0(2s)} \approx 0.0004646 \quad \text{a.u.} \quad , \\ \frac{f}{g} &= \frac{C_3^\infty(2s)}{C_3^0(2s)} = \frac{2.25}{3.5} = \frac{9}{14} \quad . \end{aligned} \quad (7.8)$$

Die nächsthöhere Ordnung im Fernbereich wird durch die Casimir-Polder-Stärke $C_4(2s)$ beschrieben. Diese folgt aus der Dipolpolarisierbarkeit (3.21) $\alpha_d(2s) = 174$ a.u., woraus mit (3.22) $C_4(2s) = 2846$ a.u. folgt. Dieser Wert

wird durch die rationale Approximation für Wasserstoff (7.6) mit einer Genauigkeit von 5% wiedergegeben

$$C_4(2s) = C_3^\infty(2s) \left(\frac{1}{f} + \frac{1}{g} \right) \approx 2692 \quad \text{a.u.} \quad . \quad (7.9)$$

Da der retardierte Anteil der Wechselwirkung hier für große Entfernungen nur einen verschwindend kleinen Beitrag liefert, liegt der Fehler von 5% im Bereich erträglicher Toleranz.

7.3 Das Verhalten der Quantenreflexion

Die Aufhebung der Niveauentartung durch die Lamb-Verschiebung bei Atom-Oberflächen-Abständen von $z > 10^8$ a.u. schränkt den Energiebereich ein, in dem das Potentialmodell (7.6) für die Quantenreflexion anwendbar ist. Aus der verallgemeinerten Umkehrpunktbedingung (4.1) finden wir

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \gg \frac{C_3^\infty(2s)}{(10^8)^3} \approx 2 \times 10^{-24} \quad . \quad (7.10)$$

Mit der Masse des Wasserstoffatoms $m = 1837$ a.u. findet man $k \gg 10^{-10}$ a.u., erst für kleinere Wellenzahlen werden relativistische Korrekturen wirksam. Die von uns betrachteten Wellenzahlen liegen im Bereich $10^{-4} - 10^{-3}$ a.u., was bereits Temperaturen im Mikrokkelvinbereich entspricht. Der Wert $k = 10^{-4}$ a.u. entspricht dabei einer Geschwindigkeit von 5.4×10^{-8} a.u., was 12cm/s entspricht. Wellenzahlen von $k \approx 10^{-10}$ a.u. entsprechen Temperaturen, die experimentell noch gar nicht zugänglich sind. In Abbildung (7.1) haben wir die mit unserem Potential (7.6) berechneten Reflektivitäten logarithmisch aufgetragen, nebst der Reflektivität des durch die rationale Approximation (6.12) gegebenen, exakten Wasserstoff-Oberflächen-Potentials. Wie zu erwarten gewesen, zeigen die Ergebnisse für kleine Wellenzahlen einen starken Einfluß des langreichweitigen Anteils der Wechselwirkung, die volle Kurve und die gepunktete Kurve liegen nahe beieinander. Erst für höhere Energien erwarten wir, so wie es in [9] experimentell für die volle Casimir-van der Waals-Wechselwirkung bereits auch bestätigt wurde, das Wirksamwerden der Nahfeldasymptotik. Im schwelennahen Bereich wird die Reflektivität universell durch Gleichung (4.22) beschrieben,

$$\lim_{k \rightarrow 0} |R(k)| \sim 1 - 2bk + \mathcal{O}(k^2) = \exp[-2bk] + \mathcal{O}(k^2) \quad , \quad (7.11)$$

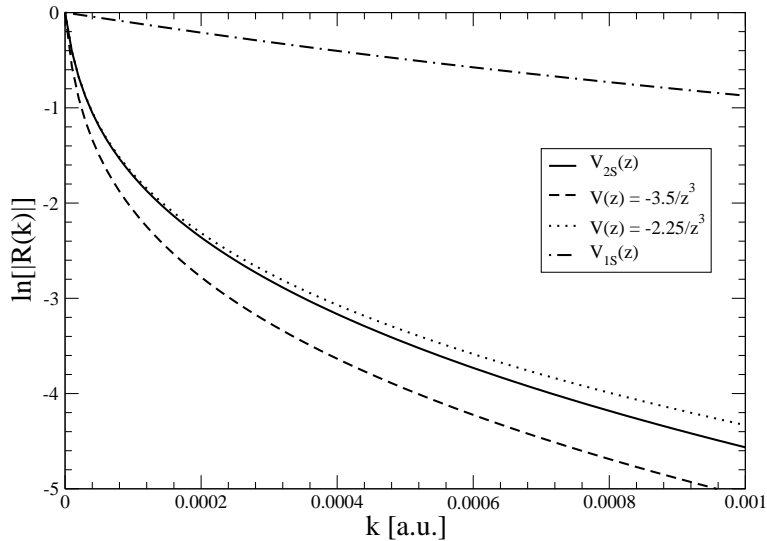


Abbildung 7.1: Reflektivitäten von $2s$ -Wasserstoff im Vergleich mit $1s$ -Wasserstoff. Die volle Linie zeigt das mit (7.6) erhaltene Ergebnis. Die gestrichelte und gepunktete Linie zeigen die Ergebnisse von homogenen $-1/z^3$ -Potentialen mit den entsprechenden Nahfeld- und Fernfeldstärken (7.2, 7.5). Die strichpunktierte Linie zeigt den Wasserstoffgrundzustand an.

wobei die Schwellenlänge für homogene $-1/z^3$ -Potentiale gegeben ist durch $b = \pi\beta_3 = \frac{2m}{\hbar^2}C_3$. Der Zusammenhang von Schwellenlänge und Potentialstärke erklärt auch, warum die Reflektivität für den Wasserstoffgrundzustand um so vieles größer ist als für den $2s$ -Wasserstoff. Die Schwellenlänge des Wasserstoffgrundzustandes ist $b(1s) = 540$ a.u., während sie für den $2s$ -Wasserstoffs $b(2s) = 25600$ a.u. ist. Das Atom-Oberflächen-Potential des Wasserstoffgrundzustandes ist also wesentlich schwächer als das des im $2s$ -Zustand angeregten Wasserstoffs und je schwächer ein Potential, desto höher die von ihm erzeugte Reflektivität.

Die ungewöhnlichen Eigenschaften des $2s$ -Wasserstoff-Oberflächen-Potentials zeigen sich noch eindrucksvoller in der Phase der Reflexionsamplitude. Die Abbildungen (7.2, 7.3) zeigen die Phasen der Reflexionsamplitude und die scheinbare Ortsverschiebung, die das Wasserstoffatom während des Reflexionsvorgangs erfährt. Wieder zeigt es sich, daß im schwellennahen Bereich das Gesamtverhalten mit dem Fernfeldverhalten übereinstimmt, während be-

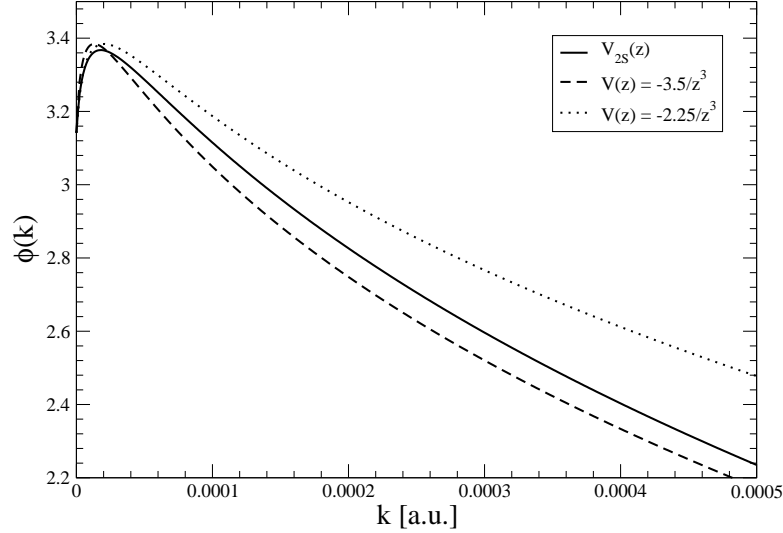


Abbildung 7.2: Phase der Reflexionsamplitude. Die volle Kurve zeigt wiederum (7.6), während die gestrichelte und gepunktete Kurve jeweils die $-1/z^3$ -Asymptotiken zeigen.

reits für Wellenzahlen $k \approx 0.0005$ a.u. in der Phase die Nahfeldasymptotik dominiert. Ein Vergleich mit Abbildung (7.1) zeigt, daß die Reflektivität wesentlich länger braucht, um in ihre Nahfeldasymptotik zu münden. Deutlich ist im Verhalten der Phasen auch das Schwellenverhalten (5.6, 5.7) für Potentiale, die sich wie $-1/z^3$ verhalten zu erkennen.

$$\lim_{k \rightarrow 0} \phi(k) \sim \pi - 2(k\beta_3) \ln[k\beta_3] \quad , \quad \lim_{k_0 \rightarrow 0} \Delta r \sim \beta_3 \ln[k_0\beta_3] \quad . \quad (7.12)$$

Die scheinbare Ortsverschiebung von $2s$ -Wasserstoff, dargestellt in Abbildung (7.3), ist ein exemplarisches Beispiel für $-1/z^3$ -Verhalten in der Natur. Für Wellenzahlen $k < 10^{-5}$ a.u. wird die Ortsverschiebung noch wesentlich kleiner als die in der Abbildung dargestellten -3000 a.u. und erreicht das divergente Verhalten eines reinen, homogenen $-1/z^3$ -Potentialschwanzes mit $\beta_3 = 2, C_3^\infty(2s) \approx 8300$ a.u. Diese stark negative Ortsverschiebung führt zu großen Zeitverzögerungen, weil die durch die Ortsverschiebung bezeichnete scheinbare Reflexionsebene sehr weit hinter die wahre Oberfläche zurückweicht. Erst für Wellenzahlen, die im Bereich $k \geq 10^{-10}$ a.u. liegen und einer Entfernung $z \approx 10^8$ a.u. von der Oberfläche entsprechen, ändert sich

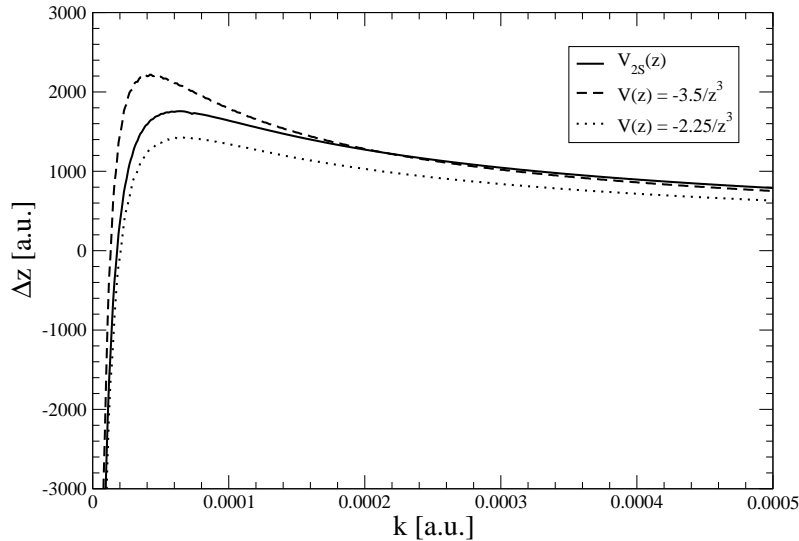


Abbildung 7.3: Scheinbare Ortsverschiebung. Die volle Kurve zeigt wiederum (7.6), während die gestrichelte und gepunktete Kurve jeweils die $-1/z^3$ -Asymptotiken zeigen.

dieses Verhalten durch den Einfluß der Spin-Bahn-Kopplung und der Lamb-Verschiebung, die zu Retardierungseffekten führen. Eine mittlere Streulänge ist damit, anders als in einem reinen $-1/z^3$ -Fall, der allerdings in Reinform in der Natur nicht realisiert ist, wenn auch stark negativ, sehr wohl definiert. Zum Vergleich haben wir auch die Ortsverschiebung für den Wasserstoffgrundzustand aufgetragen, Abbildung (7.4), mit dem für diesen Fall exakten Potential (6.12) für $\rho = 1.77$ [14]. Die Ortsverschiebung ist in diesem Falle negativ, aber endlich an der Schwelle und führt auf eine mittlere Streulänge von $\bar{a} = -52$ a.u. Im Lichte der Ergebnisse des vorangegangenen Kapitels ist klar, welche Mechanismen für dieses Ergebnis verantwortlich sind. Im schwelennahen Bereich liefert der retardierte $-1/z^4$ -Anteil des Potentials den Hauptbeitrag zur Quantenreflexion, aber dieser Beitrag zur Ortsverschiebung ist aufgrund des Zusammenspiels beider Asymptotiken, des $-1/z^3$ -Anteils und des $-1/z^4$ -Anteils negativ, aber endlich. Der balancierende Einfluß der Retardierung fehlt zwar auch im Falle von $2s$ -Wasserstoff nicht vollkommen, aber er tritt nicht, siehe (7.5), in führender Ordnung auf und ist somit nur von untergeordnetem bis kaum merklichem Einfluß. Der für große

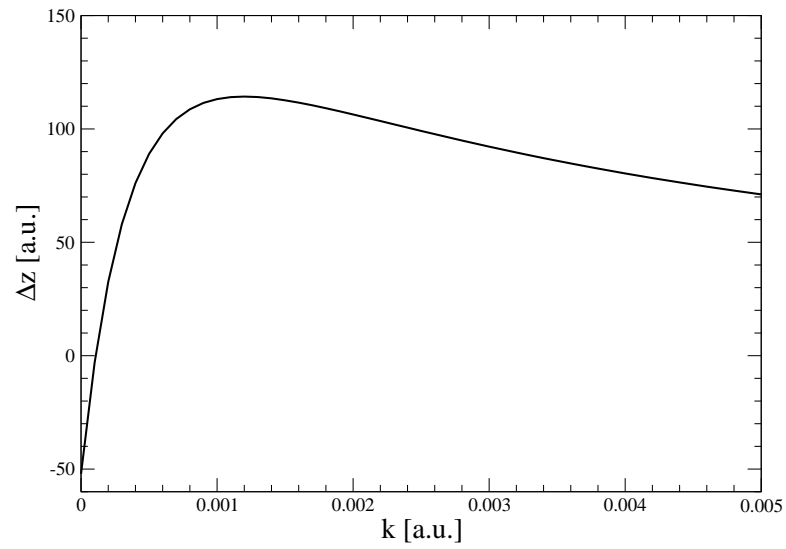


Abbildung 7.4: Scheinbare Ortsverschiebung für $1s$ -Wasserstoff, berechnet mit (6.12).

z noch vorhandene $-1/z^3$ -Anteil führt schließlich zu dem hier diskutierten, für Atom-Oberflächen-Phänomene einzigartigen Verhalten.

Kapitel 8

Ein realistisches Modell für eine Quantenreflexionsfalle

In den vorangegangenen Kapiteln haben wir die Kinematik der Quantenreflexion analysiert und uns dabei hauptsächlich auf die Atom-Oberflächen-Wechselwirkung konzentriert. Eine genaue Untersuchung der Quantenreflexionswahrscheinlichkeit wurde bereits in [14] durchgeführt. In der Modellierung einer Quantenreflexionsfalle fließen diese Ergebnisse zusammen. Die Darstellung in diesem Kapitel ist im wesentlichen durch [26] gegeben.

Die Quantenreflexion ist ein gegen äußere Einflüsse sehr unempfindlicher Mechanismus, denn sie hängt einzig und allein von der Energie der beteiligten Teilchen und der Stärke des Potentials ab. Die Idee, man könne sich die Quantenreflexion zunutze machen, um damit eine Falle für kalte Atome zu konstruieren, scheint in diesem Zusammenhange eine nur zwingende Folgerung zu sein, denn die benötigten Zutaten, hohe Reflexionswahrscheinlichkeiten für niederenergetische Atome an der Quantenregion eines Atom-Oberflächen-Potentials, werden von der Natur *frei Haus* zur Verfügung gestellt. Eine künstliche Erzeugung des Fallenpotentials, wie es bei der vielseitig verwandten harmonischen Falle vonnöten ist, kann bei der Nutzbarmachung der Atom-Oberflächen-Wechselwirkung also entfallen.

Experimentell konnte eine Quantenreflexion eines Bose-Einstein-Kondensates an einer Siliziumoberfläche bereits nachgewiesen werden [35]. Das besondere an diesem Experiment ist, daß die Quantenreflexion bei senkrechtem Einfall beobachtet werden konnte; alle anderen Experimente zur Quantenreflexion benutzten lediglich einen streifenden Einfall der Teilchen. Es wurden dabei Reflexionswahrscheinlichkeiten von 50% und mehr gemessen.

Die Ergebnisse dieses Experiments warfen die interessante Frage auf, ob und inwieweit es möglich sei, Atome in einem Hohlraum allein durch den Effekt der Quantenreflexion zu fangen. Dazu entwickeln wir im weiteren ein einfaches, aber sehr realistisches Modell einer Quantenreflexionsfalle. Ihre Modellierung fußt auf der oben erwähnten Analogie zwischen Potenzpotentialschwänzen und Stufenpotential im Limes kleiner Energien. Diese Analogie ist zur Konstruktion einer Falle maßgeschneidert, vereinfacht sie doch gerade im physikalisch interessanten Niederenergiebereich die Gegebenheiten ganz erheblich.

8.1 Realistische Modellierung der Falle

Zur Modellierung einer Quantenreflexionsfalle betrachten wir zwei planparallele Wände an den Orten $z = L$ und $z = -L$. Die durch die Wände erzeugte Atom-Oberflächen-Wechselwirkung wird hauptsächlich durch das retardierte Casimir-Polder-Potential beschrieben. Dies folgt aus allen vorangegangenen Untersuchungen zum Verhalten der Quantenreflexion bei Atom-Oberflächen-Wechselwirkung. Insbesondere auf [14] sei verwiesen, wo numerische Werte für den kritischen Parameter ρ für Alkaliatome und Wasserstoff aufgelistet sind. Diese Werte von ρ sind alle größer als 1, und somit stellt der retardierte Anteil der Wechselwirkung den Hauptbeitrag. Im weiteren vernachlässigen wir den van der Waals-Anteil vollkommen. Dies ist, wie wir sehen werden, gerechtfertigt, weil wir annehmen, daß die im allgemeinen endliche mittlere Streulänge \bar{a} sehr klein ist gegenüber den Abmessungen der Falle, also $\bar{a} \ll L$. Darüber hinaus nehmen wir an, daß die Wände des Hohlraumes einen ausreichend großen Abstand voneinander haben, so daß das Lichtfeld des Vakuums dazwischen über kontinuierliche Moden verfügt.

Das Potential zwischen den beiden Wänden kann damit angenommen werden zu

$$U(z) = -\frac{\hbar^2 \beta_4^2}{2m} \left(\frac{1}{(L-z)^4} + \frac{1}{(L+z)^4} \right) . \quad (8.1)$$

Die Wände der Falle können dabei entweder ideal leitend oder dielektrisch sein, die Materialeigenschaften der Wände beeinflussen nicht die Form des Potentials, sondern nur die Potentialstärke β_4 . Die Niederenergieeigenschaften der Quantenreflexion werden allein durch zwei Parameter bestimmt, b die Schwellenlänge und \bar{a} die mittlere Streulänge. Für ein Casimir-Polder-Potential haben diese die Werte $b = \beta_4$ und $\bar{a} = 0$. Da die Quantenreflexion

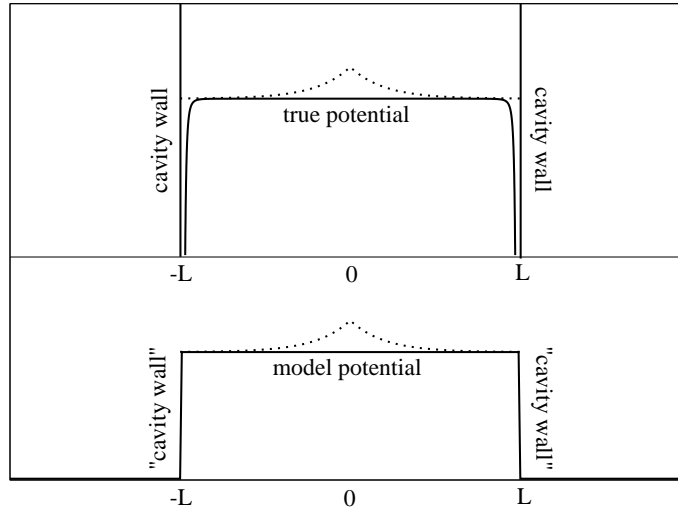


Abbildung 8.1: Schematische Darstellung einer planparallelen Quantenreflexionsfalle im Vergleich zu unserer Modellierung durch ein Stufenpotential. Physikalisch werden die Atome in der Falle an den Quantenregionen des Atom-Oberflächen-Potentials reflektiert, die sich in einem Abstand vor jeder der Wände befinden. In Schwellennähe zeigt die Reflexionsamplitude ein Verhalten wie für ein Stufenpotential mit der Länge $2L$.

hauptsächlich bei niedrigen Energien von Relevanz ist, kann man sich die im Niederenergiebereich existierende Analogie zwischen einem Potenzpotentialschwanz und dem Stufenpotential zunutze machen, um das Fallenpotential (8.1) so zu modellieren, daß das Modell zwar für kleine Energien über dieselben Eigenschaften wie (8.1) verfügt, aber rechnerisch einfacher zu handhaben ist. Wir setzen daher ein Stufenpotential als Modell an

$$U(z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\theta[|z| - L]}{b^2} . \quad (8.2)$$

Ein Vergleich zwischen (8.1), (8.2) ist in Abbildung (8.1) dargestellt. Im Modellpotential (8.2) repräsentieren die Kanten der Stufe die Quantenregion, in der die Quantenreflexion geschieht. Alle Teilchen, die über die Kanten der Stufen hinweg transmittiert werden, entsprechen den Teilchen, die nicht an der Quantenregion reflektiert werden. Diese transmittierten Teilchen sind für

das Fallensystem verloren, sie kommen nahe genug an die Wände der Falle heran, um *aus dem Verkehr gezogen zu werden*, durch inelastische Streuung mit den Oberflächenatomen oder Adsorption.

8.2 Beschreibung der Zeitentwicklung

In diesem Abschnitt geben wir eine theoretische Beschreibung der Zeitentwicklung von Wellenpaketen in unserem Modellpotential (8.2). Die Zeitentwicklung wird durch die zeitabhängige Schrödingergleichung gesteuert

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(z, t) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\theta[|z| - L]}{b^2} \right) \Psi(z, t) \quad , \quad (8.3)$$

mit der Randbedingung, daß $\Psi(z, t = 0) = A(z)\theta[L - |z|]$ ein atomarer, auf den Raumbereich der Falle eingeschränkter Anfangszustand zum Zeitpunkt $t = 0$ ist. Die Formfunktion $A(z)$ wird erst weiter unten genauer spezifiziert werden.

8.2.1 Quantenmechanische Zeitentwicklung

Mit der Einführung der natürlichen Skalierung $x = z/L$ folgt die Schrödingergleichung zu

$$i \frac{\partial}{\partial \tau} \Psi(x, \tau) = \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \sigma^2 \theta[|x| - 1] \right) \Psi(x, \tau) \quad , \quad (8.4)$$

wobei die skalierte Potentialstärke und die skalierte Zeit gegeben sind durch

$$\sigma = \frac{L}{b}, \quad \tau = \frac{t}{t_0}, \quad t_0 = \frac{2mL^2}{\hbar} \quad . \quad (8.5)$$

Die zeitabhängige Schrödingergleichung (8.4) wird durch eine Fourierentwicklung gelöst

$$\begin{aligned} \Psi(x, \tau) &= \int d\kappa A(\kappa) \varphi_\kappa(x) \exp[-i\kappa^2 \tau] \quad , \\ A(\kappa) &= \int_{-1}^1 dx \Psi(x, 0) \varphi_\kappa(x) \quad . \end{aligned} \quad (8.6)$$

Geht man mit (8.6) in (8.4) ein, so findet man die stationäre Schrödingergleichung für die gestauchten Basisfunktionen $\varphi_\kappa(x)$

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + (\kappa^2 + \sigma^2 \theta[|x| - 1]) \right] \varphi_\kappa(x) = 0, \quad \kappa = kL \quad , \quad (8.7)$$

deren Lösung Eigenzustände von gerader Parität,

$$\varphi_\kappa(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left\{ \begin{array}{ll} c_c^>(\kappa) \cos[\kappa x] & : \kappa^2 > 0 \\ c_c^<(\kappa) \cosh[|\kappa|x] & : \kappa^2 < 0 \end{array} \right\} : \quad |x| \leq 1 \quad , \quad (8.8)$$

und ungerader Parität,

$$\varphi_\kappa(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left\{ \begin{array}{ll} c_s^>(\kappa) \sin[\kappa x] & : \kappa^2 > 0 \\ c_s^<(\kappa) \sinh[|\kappa|x] & : \kappa^2 < 0 \end{array} \right\} : \quad |x| \leq 1 \quad , \quad (8.9)$$

sind. Im Außenbereich, also jenseits der Potentialstufe, ist die Lösung von (8.7) gleich

$$\varphi_\kappa(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \left[\sqrt{\kappa^2 + \sigma^2} x + \delta_{c,s}^{>,<}(\kappa) \right] : \quad |x| > 1 \quad . \quad (8.10)$$

Durch Benutzung der logarithmischen Kopplungsbedingung im Punkt $|x| = 1$ erhält man die Koeffizientenfunktionen

$$\begin{aligned} c_c^>(\kappa) &= \sqrt{\frac{\kappa^2 + \sigma^2}{\kappa^2 + \sigma^2 \cos^2[\kappa]}}, & c_c^<(\kappa) &= \sqrt{\frac{\kappa^2 + \sigma^2}{\kappa^2 + \sigma^2 \cosh^2[\kappa]}}, \\ c_s^>(\kappa) &= \sqrt{\frac{\kappa^2 + \sigma^2}{\kappa^2 + \sigma^2 \sin^2[\kappa]}}, & c_s^<(\kappa) &= \sqrt{\frac{\kappa^2 + \sigma^2}{\kappa^2 + \sigma^2 \sinh^2[\kappa]}}. \end{aligned} \quad (8.11)$$

Die Struktur des Modells führt nicht nur auf Basisfunktionen unterschiedlicher Symmetrie, sondern unterscheidet auch in Basisfunktionen oberhalb und unterhalb der Stufe. Um die Notation möglichst einfach zu halten, führen wir folgende Abkürzung ein

$$\int d\kappa f_\kappa(x, t) \varphi_\kappa(x) \equiv \int_0^\infty d\kappa f_\kappa^>(x, t) \varphi_\kappa^>(x) + \int_0^\sigma d\kappa f_\kappa^<(x, t) \varphi_\kappa^<(x) \quad . \quad (8.12)$$

Diese Abkürzung bedeutet, daß ein ohne Grenzen geschriebenes Impulsraumintegral im folgenden immer die Aufspaltung des Integranden in Anteile oberhalb und unterhalb der Stufe meint.

Man kann zeigen, daß die gefundene Basisentwicklung die Kausalitätsbedingung erfüllt. Dies zeigt man anhand des Propagators. Der Propagator des Problems ist gegeben durch

$$G(x, x', t - t') = \int d\kappa \varphi_\kappa(x) \varphi_\kappa(x') \exp[-i\kappa^2(t - t')] \quad . \quad (8.13)$$

Die Kausalitätsbedingung verlangt nun, daß gilt

$$\lim_{t \rightarrow t'} G(x, x', t - t') = \int d\kappa \varphi_\kappa(x) \varphi_\kappa(x') = \delta(x - x') \quad . \quad (8.14)$$

Im Fall $\sigma = 0$ (kein Potential) ist bekannt, daß die Basisfunktionen diese Bedingung erfüllen, denn der Propagator eines freien Wellenpaketes ist analytisch zugänglich. Die Bedingung (8.14) für den Fall $\sigma > 0$ kann nicht mehr analytisch bestimmt werden. Numerische Überprüfungen aber zeigen, daß die Aufspaltung der Basismoden in Bereiche oberhalb und innerhalb der Stufe auf die Kausalität keinerlei Einfluß hat, wie dies auch sein muß.

Um zu untersuchen, inwiefern sich die Anwesenheit des Fallenpotentials auf den Zerfall des Anfangszustandes $\Psi(x, t = 0)$ auswirkt, betrachten wir die überlebende Teilchendichte als Funktion der skalierten Zeit

$$\begin{aligned} \rho_s(\tau) &= \int_{-1}^1 \rho(x, \tau) dx = \int_{-1}^1 \Psi^*(x, \tau) \Psi(x, \tau) dx \\ &= \int_{-1}^1 dx \int d\kappa \int d\kappa' A(\kappa) A(\kappa') \varphi_\kappa(x) \varphi_{\kappa'}(x) \exp[-i(\kappa^2 - \kappa'^2)t] \quad . \end{aligned} \quad (8.15)$$

Die numerische Berechnung des Dreifachintegrals in Gleichung (8.15) ist sehr kompliziert und wird zudem erschwert, weil es sich beim Integranden um stark oszillierende Funktionen handelt. Selbst mit einer Monte-Carlo-Integration ist es schwer, eine ausreichende Genauigkeit zu erreichen. Wendet man aber die Kontinuitätsgleichung an

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \rho_s(\tau) &= -j(x, \tau) \Big|_{x=-1}^{x=1} \quad , \\ j(x, \tau) \Big|_{x=-1}^{x=1} &= \Im \left\{ \Psi^*(x, \tau) \frac{\partial \Psi(x, \tau)}{\partial x} \right\} \Big|_{x=-1}^{x=1} \quad , \end{aligned} \quad (8.16)$$

so kann man die Ortsraumintegration sparen, und das Problem reduziert sich auf die Berechnung zweier unabhängiger Impulsraumintegrale, was numerisch mit sehr guter Genauigkeit durchführbar ist. Die zeitintegrierte Stromdichte ergibt dann die überlebende Teilchendichte in der Falle.

8.2.2 Semiklassisches Modell der Zeitentwicklung

In diesem Abschnitt formulieren wir eine semiklassische Vorstellung für die Quantenreflexionsfalle. Sie wird helfen, die quantenmechanischen Vorgänge mit unserem von der klassischen Welt geprägten Anschauungsverstand in Einklang zu bringen. Um die Quantenreflexionsfalle semiklassisch zu modellieren, gehen wir zuerst von einer δ -funktionsartigen Phasenraumdichte aus

$$\rho(z, p, t = 0) = \frac{N_0}{4L} \begin{cases} \delta(p - p_0) + \delta(p + p_0) & : |z| < L \\ 0 & : |z| > L \end{cases} . \quad (8.17)$$

Diese Phasenraumdichte enthält genau N_0 links- und rechtslaufende Teilchen. An den Kanten $|z| = L$ nehmen wir an, daß mit der Wahrscheinlichkeit P eine Reflexion eintritt. Die Querungszeit T_0 ist die Zeit, die ein Teilchen mit einer Geschwindigkeit v_0 von einer Kante zur anderen benötigt,

$$T_0 = \frac{2L}{v_0} = \frac{2Lm}{p_0} . \quad (8.18)$$

Ein Bruchteil der Teilchen erreicht die Stufe nach der Zeit Δt . Da Δt in Einheiten von T_0 gemessen wird, folgt aus ihrem Verhältnis ein Faktor, der den Teilchenverlust beschreibt:

$$\Delta\chi = \frac{v_0\Delta t}{2L} = \frac{\Delta t}{T_0} . \quad (8.19)$$

Mit der angenommenen Reflexion an den Kanten kann man folgenden Ansatz für den Teilchenverlust im Zeitintervall Δt machen:

$$\frac{\Delta N}{N_0} = (1 - P)\Delta\chi = (1 - P)\frac{\Delta t}{T_0} . \quad (8.20)$$

Dieser Ansatz besagt, daß der Faktor $\Delta\chi$, multipliziert mit der Wahrscheinlichkeit $(1 - P)$ den Anteil der Teilchen beschreibt, der über die Kanten hinweg transmittiert wird und damit für das System verloren ist. Daher muß die rechte Seite gleich dem Verhältnis von Teilchenzahländerung ΔN und Anfangsteilchenzahl N_0 sein. Schreibt man (8.20) als Differentialgleichung

$$\frac{dN}{dt} = -(1 - P)\frac{N_0}{T_0} , \quad (8.21)$$

dann erhält man daraus die Teilchenzahländerung für das Intervall $0 < t < T_0$

$$N(t) = N_0 \left(1 - (1 - P)\frac{t}{T_0} \right) \Rightarrow N(T_0) = PN_0 . \quad (8.22)$$

Als Ergebnis haben wir erhalten, daß genau nach einer Querung die Teilchenzahl gegeben ist als $N(T_0) = PN_0$. Durch Rekursion finden wir nach n Querungen für das Zeitintervall $(n-1)T_0 < t < nT_0$

$$N(nT_0) = P^n N_0 \quad . \quad (8.23)$$

Aus Gleichung (8.22) folgt damit, daß die im Raumbereich der Falle $|x| < 1$ verbleibende Teilchenzahl größer ist als für $P = 0$, wie es auch sein sollte.

Als nächsten Schritt wählen wir eine stetige Impulsraumdichteverteilung $\rho(p, t = 0)$. Die Reflexionswahrscheinlichkeit ist dann ebenfalls eine stetige Funktion des Impulses, $P = P(p)$. Die Impulsraumverteilung ist auf die Anfangsteilchenzahl normiert

$$N_0 = \int \rho(p, t = 0) dp \quad . \quad (8.24)$$

Aus dieser Beziehung folgt, daß sich die zeitliche Änderung der Dichte verhalten muß wie (8.23), also

$$\rho(p, n(p)T_p) = P^{n(p)}(p)\rho(p, t = 0) \quad , \quad (8.25)$$

wobei $n(p) = t/T_p = (tp)/(2mL)$ die vom Teilchenimpuls abhängige Anzahl der Querungen ist und t die Zeit, die ein Bruchteil der verteilten Impulse benötigt, um eine der Kanten zu erreichen. Da alle beteiligten Funktionen stetig vom Impuls abhängen, wird die Impulsraumdichte nach $n(p)$ Querungen eine stetige Funktion der Zeit

$$\rho(p, t) = P^{\frac{p}{2mL}t}(p)\rho(p, 0) \quad , \quad (8.26)$$

und wenn wir als Reflexionswahrscheinlichkeit den Ausdruck der Quantenreflexion (4.22) annehmen, dann haben wir schließlich

$$\begin{aligned} \rho(p, t) &= \exp\left[-4\frac{kbp}{2mL}t\right]\rho(p, 0) \quad \Rightarrow \\ \rho_s(t) &= \int_0^\infty dk \exp\left[-4\frac{k^2bt}{2mL}\right]\rho(k, 0) \quad . \end{aligned} \quad (8.27)$$

Das in Gleichung (8.27) gegebene Verhalten der zeitabhängigen, überlebenden Dichte ist semiklassisch, weil zu seiner Herleitung die Vorstellung klassischer Trajektorien benutzt wurde. Eine quantenmechanische Beigabe ist die

Form der Reflexionswahrscheinlichkeit, wie sie aus der Theorie der Quantenreflexion folgt. Da das verwendete Exponentialgesetz nur im schwelennahen Bereich korrekt ist, erwarten wir, daß unser semiklassisches Modell erst für große Zeiten wirklich gute Ergebnisse liefert. Weiter unten werden wir aber sehen, daß es auch für kleinere Zeiten keine schlechten Ergebnisse produziert. Eine weitere quantenmechanische Beigabe ist die Impulsraumdichteverteilung $\rho(k, 0)$. In sie gehen nur die oberhalb der Potentialstufe liegenden Zustände ein, denn alle Zustände innerhalb der Stufe haben kein klassisches Gegenstück. Die genaue Form der Impulsraumdichte muß gewählt werden als

$$\rho(k, 0) = |A(k)|^2 \quad , \quad (8.28)$$

$A(k)$ ist die Impulsraumtransformierte des Anfangszustandes $\Psi(z, 0)$.

8.2.3 Quantenmechanische Asymptotik für große Zeiten

Wir leiten hier nun eine, rein von der Quantenmechanik ausgehende, Asymptotik der überlebenden Dichte für große Zeiten her. Weiter unten, wenn wir zur Diskussion der Ergebnisse kommen, werden wir sehen, daß die rein quantenmechanische Asymptotik mit der semiklassischen Näherung (8.27) übereinstimmt. Hier werden wir sehen, warum dies so sein muß. Unser Ausgangspunkt ist die zeitliche Korrelationsfunktion der Basisfunktionen

$$\begin{aligned} C(\tau) &= \int_0^\infty d\kappa \exp[-i\kappa^2\tau] \langle \varphi_\kappa^>(x) | \varphi_\kappa^>(x) \rangle + \int_0^\sigma d\kappa \exp[i\kappa^2\tau] \langle \varphi_\kappa^<(x) | \varphi_\kappa^<(x) \rangle \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\kappa \exp[-i\kappa^2\tau] |c_c^>(\kappa)|^2 \left(1 + \frac{\sin[2\kappa]}{2\kappa} \right) \\ &\quad + \frac{2}{\pi} \int_0^\sigma d\kappa \exp[i\kappa^2\tau] |c_c^<(\kappa)|^2 \left(1 + \frac{\sinh[2\kappa]}{2\kappa} \right) \quad . \end{aligned} \quad (8.29)$$

Die Korrelationsfunktion $C(\tau)$ beschreibt, wie sich die zum Zeitpunkt $\tau = 0$ stationären Zustände zeitlich verändern, sie beschreibt die Veränderungen zwischen dem Zeitpunkt $\tau = 0$ und einem späteren Zeitpunkt. Die Funktionen $|c_c^>(\kappa)|^2$, $|c_c^<(\kappa)|^2$, siehe Gleichung (8.11), beschreiben die Zustandsdichten oberhalb und innerhalb der Stufe. Diese Zustandsdichten besitzen Resonanzen für bestimmte Energiewerte κ_r . Die Resonanzen liefern die Hauptbeiträge zur Zeitentwicklung, die Gebiete zwischen ihnen tragen hingegen

nur verschwindend bei. Da also die Resonanzen immer durch Gebiete niedriger Zustandsdichte getrennt sind, kann man sie näherungsweise als isoliert betrachten und durch Breit-Wigner-Formen beschreiben

$$|c_c(\kappa)|^2 = \sum_r \frac{1}{(\kappa_r - \kappa)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_r^2} \quad . \quad (8.30)$$

Gehen wir damit in (8.29) ein, so finden wir

$$\begin{aligned} C(\tau) \approx & \frac{2}{\pi} \sum_r \int_0^\infty d\kappa \frac{\exp[-i\kappa^2\tau]}{(\kappa_r - \kappa)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_r^2} \left(1 + \frac{\sin[2\kappa]}{2\kappa}\right) \\ & + \frac{2}{\pi} \sum_r \int_0^\sigma d\kappa \frac{\exp[i\kappa^2\tau]}{(\kappa_r - \kappa)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_r^2} \left(1 + \frac{\sinh[2\kappa]}{2\kappa}\right) \quad . \end{aligned} \quad (8.31)$$

Der Bereich unterhalb der Stufe verfügt nur über eine gedämpfte Zustandsdichte. Sein Anteil kann daher ebenfalls vernachlässigt werden, so daß lediglich

$$C(\tau) \approx \frac{2}{\pi} \sum_r \int_0^\infty d\kappa \frac{\exp[-i\kappa^2\tau]}{(\kappa_r - \kappa)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_r^2} \left(1 + \frac{\sin[2\kappa]}{2\kappa}\right) \quad (8.32)$$

verbleibt. Das Impulsraumintegral in (8.32) kann mit Hilfe des Residuensatzes berechnet werden, wenn man die reelle Impulsachse in eine imaginäre Impulsachse überführt und die Singularitäten bei $\kappa = \kappa_r - \frac{i}{2}\Gamma_r$ ausnutzt. Man findet

$$C(\tau) \approx 4 \sum_r \frac{\exp[-i(\kappa_r^2 - \frac{1}{4}\Gamma_r^2)\tau]}{\Gamma_r} \left(1 + \frac{\sin[2\kappa_r]}{2\kappa_r}\right) \exp[-\kappa_r\Gamma_r\tau] \quad . \quad (8.33)$$

Als nächstes bestimmen wir die Gestalt der Resonanzbreiten Γ_r . Dazu vergleichen wir die exakte Zustandsdichte $|c_c^>(\kappa)|^2$ und die Breit-Wigner-Form (8.30) am Ort einer Resonanz κ_r und finden

$$\Gamma_r^2 = 4 \frac{\kappa_r^2 + \sigma^2 \cos[\kappa_r]}{\kappa_r^2 + \sigma^2} \quad . \quad (8.34)$$

Ist das Potential ausreichend tief, so daß für die niedrigste Resonanzenergie in guter Näherung gilt $\kappa_1/\sigma \ll 1$, dann folgt

$$\begin{aligned} \Gamma_1^2 & \approx 4 \frac{\kappa_1^2}{\sigma^2} + 4 \left(1 - \frac{\kappa_1^2}{\sigma^2}\right) \cos^2[\kappa_1] \quad , \\ \Gamma_r & \approx 2 \frac{\kappa_1}{\sigma} \sqrt{1 + \cos^2[\kappa_1] \left(\frac{\sigma^2}{\kappa_1^2} - 1\right)} \quad . \end{aligned} \quad (8.35)$$

Diese Näherung ist gerechtfertigt, weil man für die unterste Energie schreiben kann

$$\kappa_1^2 = \left(\frac{\pi}{2} + \epsilon(\sigma) \right) \quad . \quad (8.36)$$

Dabei ist $\pi/2$ der kleinste Impulseigenwert eines Kastens mit unendlich hohen Potentialwänden und $\epsilon(\sigma)$ ein Korrekturterm, der eine Funktion von σ ist und die Endlichkeit der Potentialstufe beschreibt. Ist σ groß genug, dann ist für die niedrigste Resonanzenergie $\epsilon(\sigma) \approx 0$ hinreichend gut erfüllt.

Die niedrigste Resonanz trägt die größte Zustandsdichte und ist im Limes großer Zeiten die einzige, die noch zur Zeitentwicklung beitragen kann, da sie am langsamsten zerfällt. Wir konzentrieren uns daher auf sie und vernachlässigen alle höheren Resonanzen. Dann wird (8.33) zu

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} C(\tau) = C_1(\tau) \approx 4 \frac{\exp \left[-i \left(\kappa_1^2 - \frac{1}{4} \Gamma_1^2 \right) \tau \right]}{\Gamma_1} \left(1 + \frac{\sin[2\kappa_1]}{2\kappa_1} \right) \exp[-\kappa_1 \Gamma_1 \tau] \quad . \quad (8.37)$$

Die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Zustand zur Zeit τ noch vorhanden ist, läßt sich aus der Korrelationsfunktion berechnen

$$P_1(\tau) = \left| \frac{C_1(\tau)}{C_1(0)} \right|^2 = \exp[-2\kappa_1 \Gamma_1 \tau] \quad , \quad (8.38)$$

und unter Benutzung von (8.35) finden wir

$$P_1(\tau) = \exp \left[-4 \frac{\kappa_1^2}{\sigma} \sqrt{1 + \cos^2[\kappa_1] \left(\frac{\sigma^2}{\kappa_1^2} - 1 \right)} \tau \right] \quad . \quad (8.39)$$

Mit $\kappa_1^2 = \left(\frac{\pi}{2} + \epsilon(\sigma) \right)^2 \approx \pi^2/4$ wird (8.39) näherungsweise zu

$$P_1(\tau) \approx \exp \left[-4 \frac{\kappa_1^2}{\sigma} \tau \right] \quad , \quad (8.40)$$

was genau dem durch semiklassische Überlegungen hergeleiteten Zerfallsgesetz (8.27) entspricht. Das exponentielle Zerfallsgesetz (8.40) erklärt, warum das semiklassische Modell im Limes großer Zeiten mit dem exakt quantenmechanischen Ergebnis übereinstimmt. Der Ansatz zur Beschreibung der überlebenden Dichte kann in allgemeiner Form gemacht werden,

$$\rho_s(\tau) = \int_0^\infty d\kappa \rho(\kappa, \tau = 0) P(\kappa, \tau) = \int_0^\infty d\kappa |A(\kappa)|^2 P(\kappa, \tau) \quad . \quad (8.41)$$

Dieser Ansatz geht davon aus, man könne den zeitlichen Zerfall der Impulsraum-dichte $\rho(\kappa, \tau = 0) = |A(\kappa)|^2$, die gleich der Zustandsdichte des Anfangswellenpaketes entspricht, dadurch beschreiben, daß man jedem Impulsanteil zu einer bestimmten Zeit τ eine Wahrscheinlichkeit $P(\kappa, \tau)$ zuordnet, die angibt, mit welcher Wahrscheinlichkeit dieser Anteil noch nicht zerfallen ist. Wie gut dieser Ansatz das quantenmechanisch exakte Ergebnis erfüllt, hängt davon ab, wie gut $P(\kappa, \tau)$ bestimmt werden kann. Verwendet man nur das exponentielle Zerfallsgesetz des niedrigsten Zustandes (8.40), dessen Impulsargument wieder als freie Variable κ anzunehmen ist, dann ist klar, daß diese Näherung erst dann gut werden kann, wenn alle Zustände höherer Energien schon zerfallen sind und der Zerfall sich hauptsächlich auf die Zustände der niedrigsten Resonanz beschränkt. Dies ist aber genau im Limes großer Zeiten erfüllt, weil Zustände niedriger Energie am langlebigsten sind.

8.3 Das Verhalten der zeitabhängigen Dichte

In diesem Abschnitt untersuchen wir die Zeitentwicklung eines in der Falle befindlichen Wellenpaketes. Als Anfangszustand haben wir gewählt

$$\Psi(z, t = 0) = N \exp \left[-a \left| \frac{z}{L} \right| \right] \theta[L - |z|] \quad . \quad (8.42)$$

Die Formwahl des Anfangszustandes ist in gewisser Weise arbiträr, weil sie nur einen geringen Einfluß auf die tatsächliche, zeitliche Entwicklung ausübt. Ein Unterschied besteht lediglich für die Schärfe der Anfangsverteilung. Nicht scharf lokalisierte Anfangsverteilungen, die schon zu Beginn fast uniform über den Raum verteilt sind, zerfallen zu Anfang auch schneller, weil mehr Dichtekomponenten an den Rändern liegen, als wenn die Verteilung zu Anfang gut lokalisiert ist. Für größere Zeiten spielen diese Unterschiede allerdings keine Rolle mehr.

Für alle nachfolgenden Rechnungen haben wir einen Parameterwert von $a = 5$ gewählt. Allgemein ist zwar auch die Wahl des Breitenparameters arbiträr, aber mit der Wahl $a = 5$ lassen sich, wie weiter unten gezeigt wird, realistische Bedingungen für Natrium beschreiben.

8.3.1 Die zeitabhängige Ortsraum-dichte

Die Kanten des Modellpotentials (8.2) bilden die Quantenregion des Potentialverlaufs, an dem die Quantenreflexion des Wellenpaketes erfolgt. Die Quan-

tenreflexion verhindert das freie Zerfließen des Anfangszustandes, sie verlangsamt seinen Zerfall. Um die Wirkung der Quantenreflexion eingehender zu studieren, betrachten wir zuerst die Dichte als Funktion von skaliertem Ort und skaliertem Zeit, $\rho = \rho(x, \tau)$ zu verschiedenen, diskreten Zeitwerten τ . Eine Reihe von solchen Schnappschüssen ist in Abbildung (8.2) dargestellt, in der $\rho(x, \tau)$ als Funktion von x zu jeweils festem τ aufgetragen ist. Das ausgewählte Zeitintervall $0.4 < \tau < 0.54$ entspricht dabei in etwa einer *Atmungsperiode*¹ des Wellenpaketes.

Ein freies Wellenpaket würde ungehindert zerfließen. Die Wirkung der Quantenreflexion dämpft dieses Zerfließen und erzeugt durch fortgesetzte Reflexion der einzelnen Komponenten des Wellenpaketes an den Kanten des Stufenpotentials stehende Wellen, deren zeitabhängige Ortsraumdichte als Funktion des Ortes dieses Verhalten sichtbar machen kann. Im ersten Zeitschritt, $\tau = 0.4$, liegt das Dichtemaximum im Ursprung. Durch den durch die Quantenreflexion verlangsamten Teilchenstrom über die Stufenkanten hinweg fällt in den weiteren Zeitschritten das zentrierte Maximum in sich zusammen und verlagert mehr Dichte an die Ränder hin. Zur Zeit $\tau = 0.44$ ist das Maximum erheblich abgeflacht, und die Dichte an den Rändern ist wesentlich höher als zu Beginn des Zyklus. Die Tendenz des Wellenpaketes zu zerfließen verdeutlicht sich in allen weiteren Zeitschritten noch mehr, denn die durch sie in der Dichte erzeugte Drift zu den Rändern hin führt schließlich zur Ausbildung zweier, symmetrisch angeordneter Maxima und eines Minimums in der Mitte der Falle. Ohne Quantenreflexion würde es gar nicht erst zur Ausbildung dieser symmetrischen Maxima kommen, weil die seitwärts driftenden Dichteanteile ungehindert abfließen könnten. Die durch die Kanten der Stufe induzierte Quantenreflexion aber bewirkt hier quasi eine Stauung, die sich in der Ausbildung der Maxima spiegelt. Zum Zeitpunkt $\tau = 0.48$ erfährt das zentrale Minimum seine größte Ausprägung in diesem Zyklus, und die Bewegung des Wellenpaketes kehrt sich um, indem die verbliebenen Dichteanteile von den Seiten zurück in die Mitte strömen. Der Atmungszyklus beginnt damit von neuem.

Die Darstellungen in Abbildung (8.2) zeigen also anhand einer schnappschußartig aneinandergereihten Ortsraumdichte die Wirkung der Kanten des Stufenpotentials auf das Wellenpaket. Der durch die Quantenreflexion induzierte *Rückstau* von quantenreflektierten Dichteanteilen bildet sich mit einwandfreier Deutung im Atmungsverhalten des Wellenpaketes ab. Für größere

¹Engl.: breathing mode.

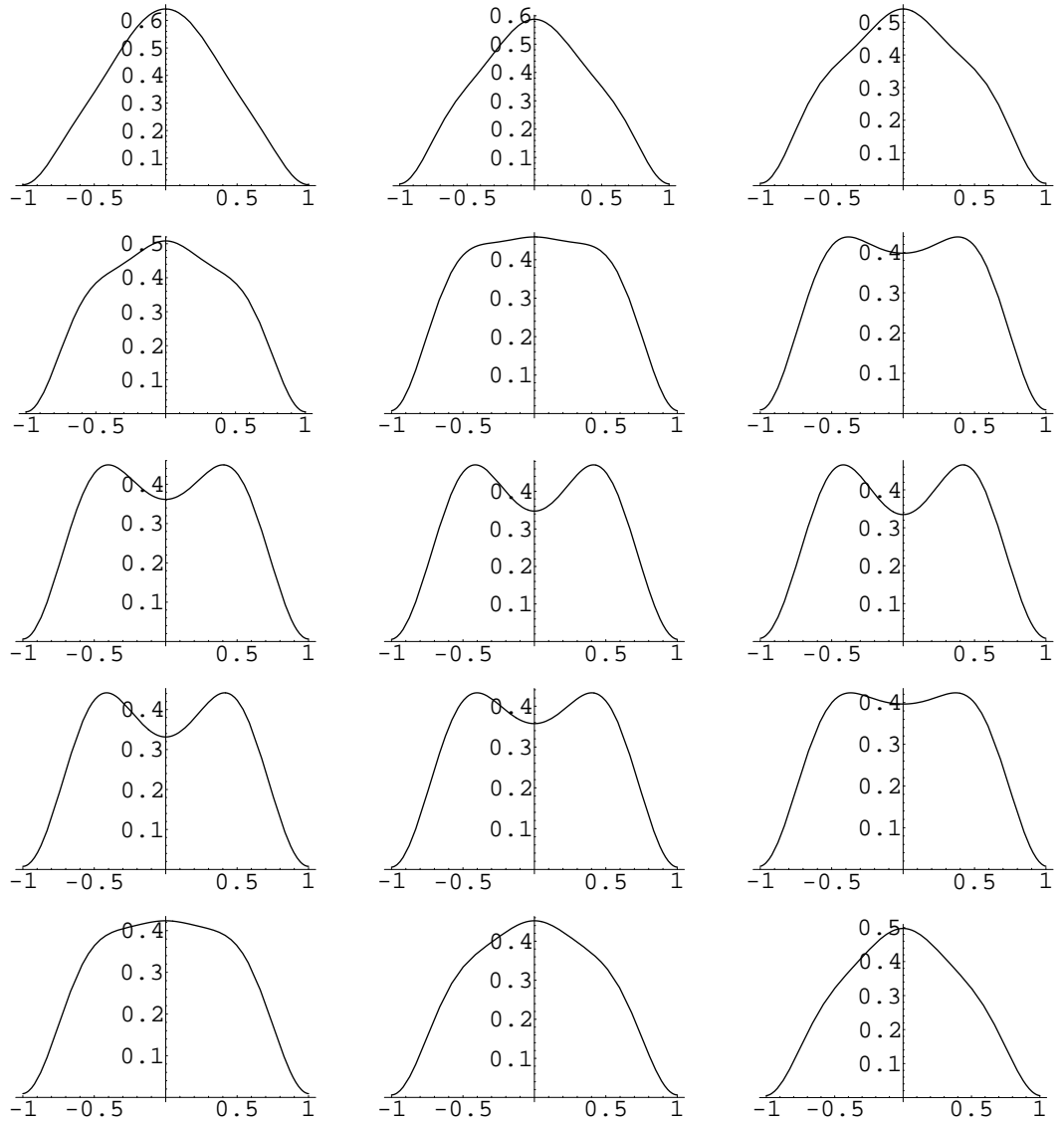


Abbildung 8.2: Ortsraumdicke $\rho(x, \tau)$ als Funktion von x zur Potentialtiefe $\sigma = 20$ zu verschiedenen Zeiten τ . Angefangen oben links, $\tau = 0.4$, bis unten rechts, $\tau = 0.54$, entspricht die Auftragung Ortsraumschnappschüssen im Abstand von $\Delta\tau = 0.01$.

Zeiten $\tau > 1$ allerdings wird die anfängliche, innere Struktur des Wellenpaketes immer weniger wichtig. Dies führt zu einer gleichmäßigen, zentrierten Verteilung der Restdichte über der Stufe, die durch die Quantenreflexion verlangsamt zerfällt. Die in Abbildung (8.2) dargestellten Atmungsvorgänge haben sich für größere Zeiten weitgehend eingestellt, weil sich durch forgesetzte Reflexion längst stehende Wellen ausgebildet haben. Die Atmung beschreibt damit eigentlich die Formierung stehender Wellen. Sind diese ausgebildet, kommt die Atmung zum Stillstand, und der Zerfall erfolgt gleichmäßig.

8.3.2 Die überlebende zeitabhängige Dichte

Wir diskutieren nun die überlebende, zeitabhängige Teilchendichte

$$\rho_s(\tau) = \int_{-1}^1 dx \rho(x, \tau) \quad . \quad (8.43)$$

Sie beschreibt den Anteil der anfänglichen Teilchendichte, der nach einer Zeit τ noch im Raumbereich $-1 < x < 1$ enthalten, also noch nicht zerfallen ist. Um den Einfluß des Potentials (8.2) auf die zeitabhängige Teilchendichte zu untersuchen, berechnen wir sie für verschiedene Potentialtiefen σ und vergleichen sie mit der Dichte eines frei zerfließenden Wellenpaketes im Raumbereich $-1 < x < 1$, siehe Abbildung (8.3). Die in Abbildung (8.3) dargestellten Teilchendichten zeigen eindeutig eine Verlangsamung des Zerfalls in Abhängigkeit von der Potentialstärke σ . Je größer σ , je tiefer also das Potential, desto größer ist der Anteil der überlebenden Teilchendichte zu gleichen Zeiten τ . Die unterste Kurve in Abbildung (8.3) zeigt zum Vergleich die Dichtekurve für den Fall $\sigma = 0$, in dem der Zerfall des Wellenpaketes nicht durch die Quantenreflexion verlangsamt wird. Die Plateaus in den Dichtekurven stehen in Zusammenhang mit den im vorangegangenen Abschnitt bereits diskutierten Atmungsvorgängen des Wellenpaketes, die durch den Rückstau von Teilchendichte an den Kanten des Potentials ausgelöst werden.

Das semiklassische Modell (8.27), das dasselbe Verhalten wie die quantenmechanische Asymptotik (8.40) besitzt, beschreibt für Zeiten $\tau < 1$ die überlebende Dichte mit einer überraschend guten Genauigkeit, ist allerdings nicht in der Lage die quantenmechanischen Oszillationen zu reproduzieren.

Abbildung (8.4) zeigt das Langzeitverhalten. Wir vergleichen das exakte quantenmechanische Ergebnis mit unserem semiklassischen Modell (8.27), beide für eine skalierte Potentialtiefe $\sigma = 20$ und mit einem frei zerfließenden Wellenpaket. Für große Zeiten $\tau \sim 10$ ist der Zerfall bereits in seinen

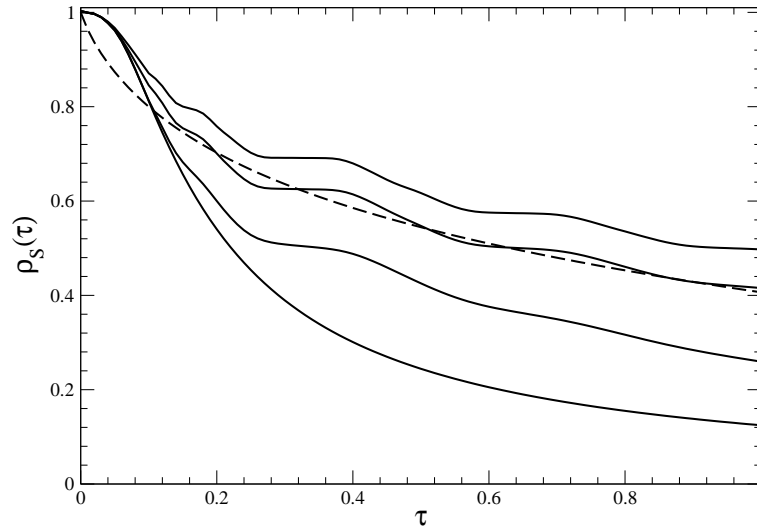


Abbildung 8.3: Überlebende Teilchendichte für verschiedene Potentialstärken $\sigma = 0, 10, 20, 30$ von unten nach oben. Die gestrichelte Linie gibt das semiklassische Modell (8.27) wieder.

Langzeitlimites eingetreten, in dem sich, aufgrund der oben bestimmten, quantenmechanischen Asymptotik, die exakt quantenmechanische Rechnung und die semiklassische Rechnung nicht mehr unterscheiden. Wir beobachten, daß die Verlangsamung des Zerfalls durch die Quantenreflexion ungefähr bis zur Zeit $\tau \sim \bar{\tau}$ wirksam ist. Danach ist in Abbildung (8.4) deutlich ein Abknicken der Dichtekurve zu beobachten. Dies erfolgt, wenn der Zerfall die niedrigste Resonanzenergie erreicht hat. Die niedrigste Resonanzenergie liegt bei einem Wert

$$\kappa_1^2 = \left(\frac{\pi}{2} + \epsilon(\sigma) \right)^2 . \quad (8.44)$$

Dabei ist $\left(\frac{\pi}{2} \right)^2$ das unterste Energieniveau eines Kastens mit unendlich hohen Wänden, während die Korrektur $\epsilon(\sigma)$ die kleinen Verschiebungen dieses Wertes durch den Einfluß endlicher Potentialtiefen beinhaltet. Aus dem Zerfallsgesetz (8.40) berechnen wir damit die ungefähre Halbwertszeit der

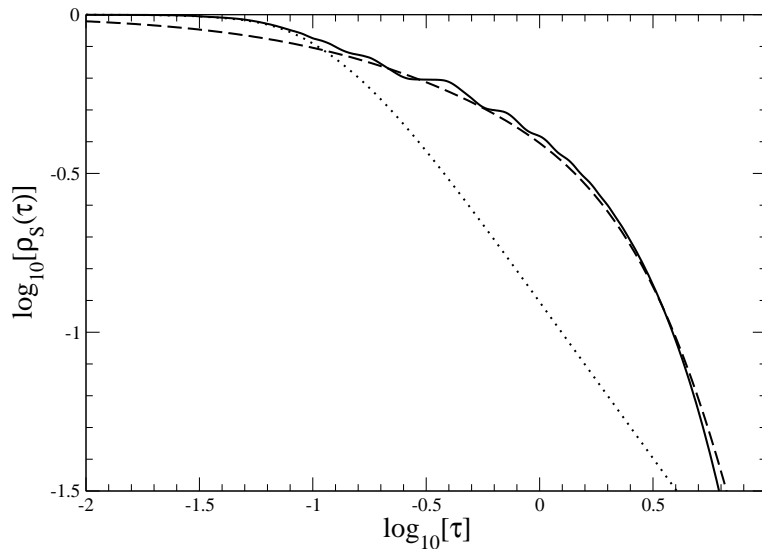


Abbildung 8.4: Langzeitverhalten der überlebenden Teilchendichte im Vergleich: quantenmechanisch exaktes Ergebnis (voll), semiklassisches Modell (8.27) (gestrichelt) für $\sigma = 20$ und das frei zerfließende Wellenpaket (gepunktet).

niedrigsten Resonanz $\bar{\tau}$

$$4 \frac{\left(\frac{\pi}{2} + \epsilon(\sigma)\right)^2}{\sigma} \bar{\tau} = 1 \quad \Rightarrow \quad \bar{\tau} = \frac{\sigma}{4 \left(\frac{\pi}{2} + \epsilon(\sigma)\right)^2} \approx \frac{\sigma}{\pi^2} \quad , \quad (8.45)$$

weil die Korrektur $\epsilon(\sigma)$ klein ist. Für $\sigma = 20$ findet man eine Halbwertszeit von $\log_{10}[\bar{\tau}] \approx 0.3$, was gut mit Abbildung (8.4) übereinstimmt. Die Halbwertszeit der niedrigsten Resonanz markiert zum einen den Eintritt des Systems in seine Langzeitasymptotik, zum anderen den Beginn eines schnelleren Zerfalls, weil die Zustandsdichte unterhalb der niedrigsten Resonanz schnell gegen Null strebt und damit keine nennenswerten Teilchendichten enthalten kann. Für andere Werte von σ findet man ähnlich gute Übereinstimmungen.

Abschließend haben wir noch überlebende Teilchendichten in verschiedenen Geometrien betrachtet, Tabelle (8.1). Man erkennt deutlich, daß die Erhöhung dimensionaler Freiheitsgrade die überlebende Teilchendichte im Fallenpotential im Vergleich zum frei zerfließenden Wellenpaket nochmals deutlich erhöht. Die Dichte für den kubischen Hohlraum ist nicht exakt, sie

σ	0	10	20	30
$\rho_s(\tau = 1)$	0.125	0.26	0.41	0.5
$\rho_s^3(\tau = 1)$	0.002	0.018	0.069	0.125
$\rho_s^{\text{sphärisch}}(\tau = 1)$	0.005	0.023	0.11	0.2

Tabelle 8.1: Überlebende Teilchendichten $\rho_s(\tau = 1)$ als Funktionen der skalierten Potentialstärke σ . $\rho_s^3(\tau = 1)$ gibt eine Schätzung des überlebenden Dichteanteils in einer kubischen Falle; $\rho_s^{\text{sphärisch}}$ gibt das exakte, numerische Ergebnis für eine kugelförmige Falle. Die Spalte $\sigma = 0$ gibt die überlebenden Dichten eines frei zerfließenden Wellenpakets an.

ist eine Schätzung aus den Werten der eindimensionalen Rechnung. Eine exakte Behandlung des kubischen Hohlraumes muß auch den Einfluß der Ecken in die Betrachtungen einbeziehen. Es besteht aber Grund zu der Annahme, daß diese nicht wirklich einen hohen Einfluß auf die Dichte ausüben. Besonders vielversprechend sind die exakten Ergebnisse für einen sphärischen Hohlraum, wo man eine Verstärkung der überlebenden Teilchendichte um nahezu einen Faktor 100 erwarten kann. Dies exakten Ergebnisse für den sphärischen Hohlraum bestätigen insgesamt die Erwartungen für den Würfel.

8.4 Ein Beispiel – Natrium

In [35] wurde das Quantenreflexionsverhalten eines Bose-Einstein-Kondensats aus Natriumatomen untersucht. Für $\sigma = 30$ und $a = 5$ besitzt das Anfangswellenpaket (8.42) eine Breite von $L/a \approx 9 \times 10^4 \text{a.u.}$, was einer Energie von $\langle E \rangle = 1.5 \times 10^{-15} \text{a.u.}$ und einer Temperatur von etwa $T \sim 1 \text{nK}$ entspricht. Die Wahl von a entspricht also den experimentellen Bedingungen in [35] bestimmt. Das Anfangswellenpaket hat somit eine sehr niedrige Energie, ähnlich Bose-Einstein-Kondensaten. Unser Anfangswellenpaket kann daher als Modell für einen s -wellenförmigen Kondensatzustand verstanden werden, dessen Zerfall unter Quantenreflexion untersucht wird. In Tabelle (8.2) führen wir die Modellparameter für Natrium auf. Die Wahl der skalierten Potentialstärke $\sigma = 20$ führt in Verbindung mit der unskalierten Potentialstärke des Atom-Oberflächen-Potentials β_4 auf einen Fallendurchmesser $2L$ von einigen Mikrometern, was ein durchaus realistischer Wert ist. Besonders interessant ist die Zeit, die ein Anfangszustand in der Falle lebt. Die Werte für t_0 ent-

$\sigma = 20$	$\beta_4[\text{a.u.}]$	$m[\text{a.u.}]$	$L[\text{a.u.}]$	$t_0[\text{a.u.}]$	$t_0[\text{s}]$
Na	1.494×10^4	4.22×10^4	4.47×10^5	1.68×10^{16}	0.41

Tabelle 8.2: Modellparameter für Natriumatome für $\sigma = 30$.

sprechen nach den Skalierungsregeln $\tau = 1$. Der Zerfall läuft eindeutig auf einer makroskopischen Zeitskala von Zehntelsekunden ab und übersteigt damit herkömmliche Fallenzeiten um Größenordnungen. Die Fallenzeit kann natürlich noch vergrößert werden, wenn man den Fallendurchmesser erhöht.

Wir haben damit klar gezeigt, daß es möglich ist, unter realistischen Bedingungen allein mit Hilfe der Quantenreflexion Atome in einem Raumreich zu fangen. Die sich ergebenden Fallenzeiten liegen dabei sogar auf einer makroskopischen Zeitskala.

Kapitel 9

Nachwort

In der vorliegenden Arbeit haben wir die Quantenreflexion von atomaren Wellenpaketen an atomaren Potenzpotentialschwänzen untersucht. Das Ziel dieser Arbeit war die Untersuchung der Kinematik des Quantenreflexionsvorgangs in solchen Potentialstrukturen. Die Atom-Oberflächen-Potentiale bildeten dabei einen besonderen Gegenstand des Interesses. Mit den vorliegenden Untersuchungen zur Kinematik der Quantenreflexion, zusammen mit den vorangegangenen Ergebnissen zur Reflexionsamplitude, hauptsächlich [8, 11, 14], kann das Gebiet der Quantenreflexion im Falle translationsinvarianter, und damit faktisch eindimensionaler Atom-Oberflächen-Systeme als weitgehend erforscht angesehen werden.

Die theoretische Formulierung einer Atomfalle, die sich der Quantenreflexion als einzigem Mechanismus bedient, geht über elementare Untersuchungen hinaus und stellt eine Anwendungsmöglichkeit dar. Zwar ist das Modell der Quantenreflexionsfalle – solange es sich um faktisch eindimensionale Systeme handelt – in der vorliegenden Arbeit ebenfalls abgeschlossen behandelt worden, aber es ergeben sich mannigfaltige Fragen daraus, die weiterer, dezidierter Erforschung bedürfen.

Ein wichtiges Ergebnis unserer Untersuchungen zur Quantenreflexionsfalle ist ihre Geometrieabhängigkeit. Die Geometrieabhängigkeit weist einen ersten Weg für weitergehende Untersuchungen. Ein erster Schritt dazu wäre die Betrachtung zwei- und dreidimensionaler, rechteckiger Fallen, die den Einfluß der Ecken berücksichtigt, und allgemeiner, parallelepipedischer Fallenstrukturen, weil nur so geklärt werden kann, welchen Einfluß die Ecken auf den Fallenmechanismus ausüben.

In diesem Zusammenhang spielt auch die feldtheoretische Erforschung

von Casimir-van der Waals-Potentialen in komplizierten Geometrien eine Rolle. Wie oben bereits bemerkt, ist das Gebiet der Casimir-van der Waals-Potentiale ein riesiges Forschungsgebiet für sich allein, aber seine starke Verbindung zum Gebiet der Quantenreflexion und damit der Konstruktion einer Quantenreflexionsfalle kann durchaus wegweisend für einen in Zukunft stark wachsenden, interdisziplinären Forschungsbereich verstanden werden, der rein feldtheoretische und materialwissenschaftliche Fragestellungen mit elementaren Fragen der Quantenmechanik verknüpft, der Zeitentwicklung eines Wellenpaketes in räumlich beschränkten Strukturen.

Zum dritten gilt es natürlich auch die Theorie der Bose-Einstein-Kondensation auf die Quantenreflexionsfalle anzuwenden. Oben haben wir darauf hingewiesen, daß wir ausschließlich Schrödingerdynamik betrachten haben, deren natürliche Erweiterung die Gross-Pitajewski-Dynamik ist. Erst durch die Einbeziehung der interatomaren Wechselwirkung, ihrer Wirkung auf das durch ein Molekularfeld beschriebene Kondensat in einer Quantenreflexionsfalle und einer weitergehenden Einbeziehung von Quantenfluktuationskorrekturen kann klären, welche Vorteile eine Quantenreflexionsfalle gegenüber den herkömmlichen, in der Literatur diskutierten und im Experiment verwandten Fallenmechanismen wirklich bietet.

Mit dem Hinweis auf die drei oben genannten, sich praktisch von selbst ergebenden, weiterführenden Fragestellungen möchte ich diese Arbeit beenden und abschließend feststellen, daß die Theorie der Quantenreflexion an Atom-Oberflächen-Potentialen und ihre Anwendung ein Forschungsgebiet ist, das mehr denn je unsere Phantasie und unseren Erkenntnisdrang anregen wird, weil dieses unscheinbare und einfache Phänomen die Kraft besitzt ganz unterschiedliche Wissensgebiete innerhalb der Physik zusammen zu bringen und gegenseitig zu befruchten.

Anhang A

Analytisches Schwellenverhalten

A.1 Schwellenverhalten für $\alpha = 3$

Die Lösung der Schrödingergleichung für $k = 0$ kann durch eine Hankelfunktion [37]

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{x}{\beta_3}} H_1^{(1)} \left(2\sqrt{\frac{\beta_3}{x}} \right) \quad (\text{A.1})$$

ausgedrückt werden. Im Limes $x \rightarrow 0$ nimmt diese Wellenfunktion die Gestalt einer linkslaufenden WKB-Welle an:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \Psi(x) \sim \left(\frac{x}{\beta_3} \right)^{3/4} \exp \left[i2\sqrt{\frac{\beta_3}{x}} \right] . \quad (\text{A.2})$$

Damit erfüllt die Wellenfunktion das korrekte Grenzverhalten für kleine Werte von x . Die Reflexionsamplitude wird durch das asymptotische Verhalten, $x \rightarrow \infty$ der Wellenfunktion bestimmt. Um dieses zu gewinnen, zerlegt man die Hankelfunktion in eine Besselfunktion und eine Neumannfunktion

$$H_1^{(1)}(x) = J_1(x) + iN_1(x) \quad (\text{A.3})$$

und benutzt deren asymptotische Entwicklung [1]. Man findet

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \Psi(x) \sim 1 + \frac{i}{\pi} \left(-\frac{x}{\beta_3} + \ln \left[\frac{\beta_3}{r} \right] \right) + i\mathcal{O}(1) . \quad (\text{A.4})$$

Die logarithmische Ableitung davon lautet

$$\frac{\Psi'(x)}{\Psi(x)} = A = \frac{1}{\beta_3} \frac{1}{\frac{x}{\beta_3} + \ln \left[\frac{x}{\beta_3} \right]}, \quad (\text{A.5})$$

wobei nur die für $x \rightarrow \infty$ relevanten Terme beibehalten wurden. Aus der logarithmischen Anschlußbedingung folgt

$$\begin{aligned} A &= -ik \frac{1 - R(k)}{1 + R(k)} \exp[-2ikx] \Rightarrow \\ R(k) &= -\frac{A + ik}{A - ik} \exp[-2ikx] \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Asymptotisch gilt $(kx) \rightarrow 0$ und außerdem natürlich $k \rightarrow 0$, woraus folgt

$$\begin{aligned} R(k) &= -\frac{A + ik}{A - ik} \frac{1 - ikx}{1 + ikx} = -\frac{\left(1 + ikx + ik\beta_3 \ln \left[\frac{x}{\beta_3} \right]\right) (1 - ikx)}{\left(1 - ikx - ik\beta_3 \ln \left[\frac{x}{\beta_3} \right]\right) (1 + ikx)} \\ &= -\frac{1 + ik\beta_3 \ln \left[\frac{x}{\beta_3} \right]}{1 - ik\beta_3 \ln \left[\frac{x}{\beta_3} \right]} + \mathcal{O}(k^2 x \beta_3) \\ &\sim -1 + 2i(k\beta_3) \ln[kx] - 2i(k\beta_3) \ln[k\beta_3] \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Der Grenzfall an der Schwelle wird bestimmt durch $k\beta_3 \rightarrow 0$; gleichzeitig gilt $kx \rightarrow 0$, aber dieses Produkt geht langsamer gegen Null als $k\beta_3$, weil $x \rightarrow \infty$. Die führende Ordnung folgt damit zu

$$\begin{aligned} R(k) &= -1 + i2(k\beta_3) \ln[k\beta_3], \\ \phi(k) &= \pi - 2(k\beta_3) \ln[k\beta_3] \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

A.2 Schwellenverhalten für $\alpha = 4$

Dieser Fall ist in gewisser Weise ein Sonderfall, weil die Schrödingergleichung im Fall $\alpha = 4$ eine exakte analytische Lösung besitzt. Sie wurde von O'Malley, Spruch und Rosenberg [34] ausgearbeitet. Die Wellenfunktion kann im wesentlichen durch eine Mathieufunktion ausgedrückt werden

$$\Psi(x) = M_{\pm\nu(\beta_4 k)} \left(\ln \left[x \sqrt{\frac{\beta_4}{k}} \right] \right) \quad . \quad (\text{A.9})$$

Weiterhin treten in der Theorie der Mathieufunktionen Parameterfunktionen auf:

$$\begin{aligned}\nu(\beta_4 k) &= \frac{1}{2} + \frac{2}{3}(\beta_4 k)^2 + \mathcal{O}(k^4) \quad , \\ \delta(\beta_4 k) &= \frac{\pi}{2} \left[\nu(\beta_4 k) - \frac{1}{2} \right] = \frac{\pi}{3}(\beta_4 k)^2 + \mathcal{O}(k^4) \quad .\end{aligned}\tag{A.10}$$

Mit Hilfe dieser Parameterfunktionen haben O'Malley, Spruch und Rosenberg gezeigt, daß gilt

$$\lim_{x \rightarrow 0} \Psi(x) \sim \frac{x}{\beta_4} \exp \left[i \frac{\beta_4}{x} \right] \quad ,\tag{A.11}$$

was der WKB-Wellenfunktion entspricht. Interessant für die Herleitung asymptotischen Schwellenverhaltens ist der asymptotische Grenzfall, für den ebenfalls eine Wellenfunktion konstruiert werden konnte:

$$\begin{aligned}\lim_{x \rightarrow \infty} \Psi(x) &= \frac{1}{2 \cos[2\delta(\beta_4 k)]} \{ [A_1 + B_2 + i(A_2 - B_1)] \exp[ikx] \} \\ &\quad + \frac{1}{2 \cos[2\delta(\beta_4 k)]} \{ [A_1 - B_2 + i(A_2 + B_1)] \exp[-ikx] \} \quad , \\ A_1 &= \sin[\delta(\beta_4 k)] \cos[\delta(\beta_4 k)] \left(1 - \frac{1}{\beta_4 k} \right) \quad , \\ A_2 &= \cos^2[\delta(\beta_4 k)] - \frac{\sin^2[\delta(\beta_4 k)]}{\beta_4 k} \quad , \\ B_1 &= \frac{\cos^2[\delta(\beta_4 k)]}{\beta_4 k} - \sin^2[\delta(\beta_4 k)] \quad , \\ B_2 &= -A_1 \quad .\end{aligned}\tag{A.12}$$

Setzt man diese Wellenfunktion in die Formel für den Reflexionskoeffizienten ein und entwickelt nach kleinen Argumenten $\beta_4 k$, so findet man

$$\begin{aligned}R(k) &= \frac{i(\beta_4 k - 1)}{2 \sin \left[\frac{\pi}{3}(\beta_4 k)^2 \right] \cos \left[\frac{\pi}{3}(\beta_4 k)^2 \right] + i \cos \left[\frac{2\pi}{3}(\beta_4 k)^2 \right] (\beta_4 k + 1)} \quad , \\ &\approx \frac{i(\beta_4 k - 1)}{-2 \frac{\pi}{3}(\beta_4 k)^2 + i(\beta_4 k + 1)} \\ &\approx -1 + 2(\beta_4 k) - i \frac{2}{3} \pi (\beta_4 k)^2 \Rightarrow \\ \phi(k) &= \pi - \frac{2}{3} \pi (\beta_4 k)^2 \quad .\end{aligned}\tag{A.13}$$

Die Tatsache, daß die Reflexionsphase an der Schwelle quadratischer Ordnung ist, bedeutet, daß dieses Potential eine mittlere Streulänge von Null besitzt.

A.3 Schwellenverhalten für $\alpha > 4$

Für arbiträre Potenzen $\alpha > 4$ wird die Schrödingergleichung bei $k = 0$ durch eine Hankelfunktion [37]

$$\Psi_\alpha(x) = \sqrt{x} H_{\frac{1}{\alpha-2}}^{(1)} \left[\frac{2}{\alpha-2} \left(\frac{\beta}{x} \right)^{\frac{\alpha}{2}-1} \right] \quad (\text{A.14})$$

gelöst. Im Grenzfall kleiner x geht diese Wellenfunktion in die WKB-Form über, man findet

$$\lim_{x \rightarrow 0} \Psi_\alpha(x) = \sqrt{\frac{\alpha-2}{\pi}} x^{\frac{\alpha}{4}} \beta^{\frac{1}{2}-\frac{\alpha}{4}} \exp \left[i \frac{2}{\alpha-2} \left(\frac{\beta}{x} \right)^{\frac{\alpha}{2}-1} - i \frac{\pi\alpha}{4(\alpha-2)} \right] . \quad (\text{A.15})$$

Um das asymptotische Verhalten $x \rightarrow \infty$ herausarbeiten zu können, bietet sich eine Darstellung der Hankelfunktion durch Besselfunktionen an [1],

$$H_\nu^{(1)}(x) = \frac{i}{\sin[\pi\nu]} [e^{-i\pi\nu} J_\nu(x) - J_{-\nu}(x)] , \quad (\text{A.16})$$

deren asymptotische Entwicklung gegeben ist durch

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow \infty} \Psi_\alpha(x) = & \frac{i}{\sin \left[\frac{\pi}{\alpha-2} \right]} \left[\frac{\exp \left[-i \frac{\pi}{\alpha-2} \right] \sqrt{\beta}}{(\alpha-2)^{\frac{1}{\alpha-2}} \Gamma \left[1 + \frac{1}{\alpha-2} \right]} \left(1 + \mathcal{O} \left(\left(\frac{1}{x} \right)^{\alpha-2} \right) \right) \right] \\ & - \frac{i}{\sin \left[\frac{\pi}{\alpha-2} \right]} \left[\frac{x (\alpha-2)^{\frac{1}{\alpha-2}}}{\sqrt{\beta} \Gamma \left[1 - \frac{1}{\alpha-2} \right]} \left(1 + \mathcal{O} \left(\left(\frac{1}{x} \right)^{\alpha-2} \right) \right) \right] . \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Aus der Verknüpfung mit asymptotisch ebenen Wellen folgt die Reflexionsamplitude

$$\begin{aligned}
R(k) &= - \frac{1 - ik\beta \exp\left[-i\frac{\pi}{\alpha-2}\right] \left(\frac{1}{\alpha-2}\right)^{\frac{2}{\alpha-2}} \frac{\Gamma\left[1-\frac{1}{\alpha-2}\right]}{\Gamma\left[1+\frac{1}{\alpha-2}\right]}}{1 + ik\beta \exp\left[-i\frac{\pi}{\alpha-2}\right] \left(\frac{1}{\alpha-2}\right)^{\frac{2}{\alpha-2}} \frac{\Gamma\left[1-\frac{1}{\alpha-2}\right]}{\Gamma\left[1+\frac{1}{\alpha-2}\right]}} \rightarrow \\
R(k) &\approx -1 + i2(k\beta) \exp\left[-i\frac{\pi}{\alpha-2}\right] \left(\frac{1}{\alpha-2}\right)^{\frac{2}{\alpha-2}} \frac{\Gamma\left[1-\frac{1}{\alpha-2}\right]}{\Gamma\left[1+\frac{1}{\alpha-2}\right]} \rightarrow \quad (\text{A.18}) \\
R(k) &\approx - \left(1 - 2kb_\alpha - i \frac{2kb_\alpha}{\tan\left[\frac{\pi}{\alpha-2}\right]}\right) , \\
b_\alpha &= \beta \sin\left[\frac{\pi}{\alpha-2}\right] \left(\frac{1}{\alpha-2}\right)^{\frac{2}{\alpha-2}} \frac{\Gamma\left[1-\frac{1}{\alpha-2}\right]}{\Gamma\left[1+\frac{1}{\alpha-2}\right]} .
\end{aligned}$$

Die Reflexionsphase folgt damit zu

$$\phi(k) = \pi - \frac{2kb_\alpha}{\tan\left[\frac{\pi}{\alpha-2}\right]} = \pi - 2k\bar{a} \quad , \quad (\text{A.19})$$

wobei \bar{a} der mittleren Streulänge entspricht.

A.4 Schwellenverhalten des Shimizupotentials

Für das ShimizuPotential (6.9) wird die Schrödingergleichung bei $k = 0$ von einer Wellenfunktion [14, 37]

$$\Psi(x) = \sqrt{x(x+1)} H_1^{(1)} \left[2\rho \sqrt{1 + \frac{1}{x}} \right] \quad (\text{A.20})$$

gelöst. Die Wellenfunktion nimmt asymptotisch die Gestalt

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \Psi(x) = \rho H_0^{(1)}(2\rho) + x H_1^{(1)}(2\rho) \quad (\text{A.21})$$

an. Die Anschlußbedingung an die ebenen Wellen liefert die Reflexionsamplitude

$$\begin{aligned}
R(\kappa_l) &= - \frac{H_1^{(1)}(2\rho) + i\kappa_l \rho H_0^{(1)}(2\rho)}{H_1^{(1)}(2\rho) - i\kappa_l \rho H_0^{(1)}(2\rho)} \rightarrow \\
R(\kappa_l) &\approx -1 - i2\kappa_l \rho \frac{H_0^{(1)}(2\rho)}{H_1^{(1)}(2\rho)} . \quad (\text{A.22})
\end{aligned}$$

Nach Trennung von Real- und Imaginärteil und unter Ausnutzung der Wronskideterminante für Bessel- und Neumannfunktionen hat man

$$R(\kappa_l) = -1 + \pi^{-1} 2\kappa_l \frac{1}{J_1^2(2\rho) + N_1^2(2\rho)} - i 2\kappa_l \rho \frac{J_0(2\rho)J_1(2\rho) + N_0(2\rho)N_1(2\rho)}{J_1^2(2\rho) + N_1^2(2\rho)}. \quad (\text{A.23})$$

Die Reflexionsphase an der Schwelle folgt daraus zu

$$\phi(\kappa_l) = \pi + 2\kappa_l \rho \frac{J_0(2\rho)J_1(2\rho) + N_0(2\rho)N_1(2\rho)}{J_1^2(2\rho) + N_1^2(2\rho)}. \quad (\text{A.24})$$

Damit folgt, daß die mittlere Streilänge des Casimir-van der Waals-Potentials negativ ist. Dies entspricht dem Verhalten der Reflexionsphasen, die insbesondere für kleine k stark attraktives Verhalten zeigen.

Literaturverzeichnis

- [1] M. Abramowitz, I. A. Stegun (Eds.): *Handbook of Mathematical Functions*, Dover Publications New York, 1968.
- [2] G. Barton: Frequency shifts near an interface: Inadequacy of two-level atomic models, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, **7**, 16, 1974.
- [3] M. V. Berry, K. E. Mount: *Semiclassical approximations in wave mechanics*, *Rep. Prog. Phys.* **35**, 1972.
- [4] H. A. Bethe, E. E. Salpeter in S. Flügge (Hrsg.): *Handbuch der Physik*, Springer Verlag Berlin, 1957.
- [5] L. Brillouin, *C. R. Hebd. Acad. Sci.* **183**, 24, 1926.
- [6] H. B. G. Casimir, D. Polder: The influence of Retardation on the London-van der Waals Forces, *Phys. Rev.* **73**, 4, 1948.
- [7] D. Chauvat, Chr. Bonnet, K. Dunseath, O. Emile, A. Le Floch: Timing the total reflection of light, *Phys. Lett. A* **336**, 271, 2005.
- [8] R. Côte, H. Friedrich, J. Trost: Reflection above Potential steps, *Phys. Rev. A*, **56**, 3, 1997.
- [9] V. Druzhinina, M. DeKieviet: Experimental Observation of Quantum Reflection far from Threshold, *Phys. Rev. Lett* **91**, 19, 2003.
- [10] J. D. Dshaloschinsky, E. M. Lifschitz, L. P. Pitajewsky: The General Theory of Casimir Forces, *Sov. Phys. Usp.* **4**, 153, 1961.
- [11] Chr. Eltschka: *WKB im antiklassischen Grenzfall*, Dissertation TU-München, Shaker Verlag, 2001.

-
- [12] G. Feinberg, J. Sucher: General Theory of the van der Waals Interaction: A Model-Independent Approach, *Phys. Rev. A* **2**, 6, 1970.
- [13] H. Friedrich: *Theoretical Atomic Physics*, third Edition, Springer Verlag Berlin, 2005.
- [14] H. Friedrich, G. Jacoby, C. G. Meister: Quantum Reflection by Casimir-van der Waals Potential tails, *Phys. Rev. A*, **65**, 032902, 2002.
- [15] H. Friedrich, A. Jurisch: Quantum Reflection Times for Attractive Potential Tails, *Phys. Rev. Lett.*, **92**, 103202, 2004.
- [16] H. Friedrich, A. Jurisch: Quantum reflection of metastable hydrogen atoms by a conducting surface, *Phys. Lett. A* **335**, 2005.
- [17] H. Friedrich, J. Trost: *Working with WKB waves far from the semiclassical Limit*, *Phys. Rep.* **397**, 6, 2004.
- [18] N. Frömann, P. O. Frömann: *Phase Integral Method*, Springer Verlag NewYork, 1996.
- [19] G. Gamow: Quantum theory of atomic nucleus, *Z. f. Phys.* **51**, 204, 1928.
- [20] G. Gamow: Quantum theory of nuclear disintegration, *Nature* **122**, 805, 1928.
- [21] G. Gamow: *Constitution of Atomic Nuclei and Radioactivity*, Oxford University Press, London, 1931.
- [22] F. Goos, H. Hänchen: Ein neuer und fundamentaler Versuch zur Totalreflexion, *Ann. Phys. (Leipzig)* **1**, 333, 1947.
- [23] X. W. Halliwell, H. Friedrich, S. T. Gibson, K. G. H. Baldwin: Quantum Reflection of metastable helium 2^3S atoms in hollow optical fibres, *Opt. Comm.* **224**, 89ff. 2003.
- [24] B. Holstein: The van der Waals Interaction, *Am. J. Phys.* **69**, 4, 2001.
- [25] A. Jurisch, H. Friedrich: Quantum reflection times and space shifts for Casimir-van der Waals Potential tails, *Phys. Rev. A*, **70**, 032711, 2004.
- [26] A. Jurisch, H. Friedrich: A Realistic Model of a Quantum Reflection Trap, wird in *Phys. Lett. A* veröffentlicht.

-
- [27] H. A. Kramers: Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung Z. Phys. **39**, 828, 1926.
- [28] L. D. Landau, E. M. Lifschitz: *Klassische Mechanik*, Lehrbuch der theoretischen Physik Band I, VEB Deutsche Verlagsunion, 1978.
- [29] E. M. Lifschitz: The Theory of Molecular Attractive Forces between Solids, Sov. Phys. JETP, **2**, 1, 1956.
- [30] M. Marinescu, A. Dalgarno, J. F. Babb: Retarded long-range potentials for the alkali-metal atoms and a perfectly conducting wall, Phys. Rev. A **55**, 1530, 1997.
- [31] D. Meschede, W. Jhe, E. A. Hinds: Radiative properties of atoms near a conducting plane: An old problem in a new light, Phys. Rev. A, **41**, 3, 1990.
- [32] Kimball A. Milton: *The Casimir Effect, Physical Manifestation of Zero-Point Energy*, World Scientific Publishing, 2001.
- [33] A. Mody, M. Haggerty, J. M. Dolye, E. J. Heller: No-sticking effect and quantum reflection in ultracold collisions, Phys. Rev. B, **64**, 085418, 2001.
- [34] T. F. O'Malley, L. Spruch, L. Rosenberg: Modification of Effective-Range Theory in the Presence of a Long-Range (r^{-4}) Potential, J. Math. Phys. **2**, 491, 1961.
- [35] T. A. Pasquini, Y. Shin, C. Sanner, M. Saba, A. Schirotzek, D. E. Pritchard, W. Ketterle: Quantum Reflection of a Bose-Einstein Condensate at Normal Incidence, Phys. Rev. Lett. **93**, 2004, 223201.
- [36] V. L. Pokrovskii, S. K. Savvinykh and F. R. Ulinich: Reflection from a barrier in the quasi-classical Approximation, Sov. Phys. JETP, **34**, 5, 1958.
- [37] A. D. Polyanin, V. F. Zaitsev: *Handbuch der Linearen Differentialgleichungen*, Spektrum Akad. Verlag Heidelberg, 1996, s. 46.
- [38] J. Schwinger, L. L. De Raad, Jr. K. A. Milton: Casimir Effect in Dielectrics, Ann. Phys. **115**, 1978.

- [39] F. Shimizu: Specular Reflection of Very Slow Metastable Neon Atoms from a Solid Surface, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 6, 2001.
- [40] Y. Tikochinsky, L. Spruch: Retarded Casimir interaction in the asymptotic domain of an electron and a dielectric wall, *Phys. Rev. A* **48**, 4223, 1993.
- [41] G. Wentzel: Eine Verallgemeinerung der Quantenbedingung für die Zwecke der Wellenmechanik, *Z. Phys.* **38**, 518, 1926.
- [42] Eugene P. Wigner: Lower Limit for the Energy Derivative of the Scattering Phase Shift, *Phys. Rev.* **98**, 1, 1955.
- [43] Z.-C. Yan, J. F. Babb: Long-range interactions of metastable helium atoms, *Phys.Rev. A* **58**, 1247, 1998.

Danksagung

Mein Dank an dieser Stelle gilt:

Meinem Betreuer, Prof. Dr. Harald Friedrich, für die interessante Aufgabenstellung und für sein nie erlahmendes Interesse am Fortgang der Arbeit, für seine ständige Gesprächsbereitschaft und seine Anregungen. Ich habe viel von ihm gelernt. Seine Fähigkeit eine rundum angenehme Arbeitsatmosphäre zu schaffen - und das ist keine Selbstverständlichkeit - hat wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Dem Stellvertreter Dudens auf Erden, meinem Freund Franz Adam, der mutig zwischen meine marodierenden Satzzeichen fuhr, und nicht eher ruhte als bis er sah, das es gut war.