Semiklassische Näherung der radialen Dirac–Gleichung

DIPLOMARBEIT

von
Martin Menzel

durchgeführt am
Fachbereich Physik
der Universität Kaiserslautern

unter Anleitung von
Prof. Dr. Heinz Krüger

Dezember 1992 (1. verbesserte Version)

Zusammenfassung

In der nichtrelativistischen Schrödinger–Theorie hat sich die nach G. Wentzel [19], H. A. Kramers [12] und L. Brillouin [3] benannte WKB–Näherung eine weitreichende Akzeptanz verschafft. Obwohl diese Methode meist nur als WKB–Methode bezeichnet wird, war von H. Jeffreys [9] zuerst eine solche Näherungsmethode vorgestellt worden. Es liegt nahe, in einer relativistischen Theorie eine entsprechende Näherungsmethode zu diskutieren. Ich habe verschiedene semiklassische Näherungen für die radiale Dirac–Gleichung untersucht. Analytische und numerische Diskussionen der verschiedenen Methoden haben gezeigt, daß die Güte der Näherung wesentlich von der Entkopplung der Radialgleichung abhängt. Speziell für das Coulomb–Potential habe ich eine näherungsfreie Entkopplung entwickelt, welche zu einer WKB–Quantenbedingung führt, die mit der Feinstrukturformel von Sommerfeld übereinstimmt. Für viele physikalisch relevante Potentiale, welche das Coulomb–Potential nur leicht abändern, wird somit eine weitaus größere Genauigkeit als bei herkömmlichen WKB–Näherungen erster Ordnung erreicht. Außerdem habe ich höhere Korrekturen zur WKB–Näherung untersucht.

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

Das WKB–Verfahren ist ursprünglich ein Näherungsverfahren für die von E. Schrödinger aufgestellte Materiewellengleichung. Der Grundgedanke dieser Näherung nutzt beim Lösen der Schrödinger–Gleichung aus, daß die in ihr enthaltene Konstante $\hbar = h/2\pi$ (h : Plancksches Wirkungsquantum) fast Null ist, im Vergleich zu den restlichen Größen.

In der vorliegenden Arbeit habe ich diverse WKB–Verfahren für die gebundenen Zustände der Dirac–Gleichung ($E < mc^2$) zu Zentralpotentialen untersucht.

Die historischen WKB–Approximationen für die Schrödinger–Theorie der Zentralpotentiale werden an der durch Separation hergestellten radialen Schrödinger–Gleichung durchgeführt. Dabei werden meist zwei Differentialgleichungen zweiter Ordnung – die radiale Schrödinger–Gleichung und die des harmonischen Oszillators – mittels Liouville–Transformation aufeinander abgebildet. Die genäherten Lösungen werden mittels den bekannten harmonischen Oszillatorlösungen dargestellt. Die Approximation besteht in einer Vernachlässigung von Termen der Ordnung $\mathcal{O}(\hbar^2)$ bei der Liouville–Transformation.

In der Dirac–Theorie ist ein analoges Vorgehen nicht a priori möglich, da die radiale Dirac–Gleichung ein gekoppeltes System von Differentialgleichungen erster Ordnung ist. Ein wesentlicher Schritt aller WKB–Verfahren an der Dirac–Gleichung liegt in der mehr oder weniger geschickten Entkopplung des Differentialgleichungssystems. Bei Verfahren mit ungünstiger Entkopplung (zumindest für das Coulomb–Problem) [10] hat sich eine Verbesserung als, nur mit viel Aufwand, durchführbar herausgestellt. Ich habe numerische und analytische Berechnungen durchgeführt, um im Fall des Coulomb–Potentials einen direkten Vergleich zwischen WKB–Energiewerten und den exakten Sommerfeld–Energien aufzuzeigen.

Wesentlich bessere Ergebnisse erhält man, wenn man meine in Kapitel 5 vorgestellte Entkopplung der Radialgleichung benutzt. Für coulombähnliche Potentiale (z.B. Coulomb–Potential mit Abschirmung) sind WKB–Energien zu erwarten, deren Fehler deutlich kleiner als die Feinstrukturaufspaltung ist, da für ein reines Coulomb–Feld bereits die exakten Sommerfeld–Energien reproduziert werden. Außderdem konvergiert das von mir entwickelte WKB–Verfahren auch noch für sehr ungünstige Energiestartwerte, im Gegensatz zu Verfahren die auf das Good–Verfahren aufbauen. Das liegt daran, daß bei meinem Verfahren im wesentlichen nur der äußere radiale Umkehrpunkt mit der Energie verschoben wird, um die Quantisierungsbedingung zu erfüllen, während sonst die Form der zu integrierenden Funktion völlig verändert wird. Ist der Startwert für die Energie weit vom Bindungsenergiewert entfernt, so kann es vorkommen, daß man gar keine reellen Nullstellen mehr findet, so daß das WKB–Integral nicht mehr definiert ist.

Kapitel 2

Exakte Lösungen der Dirac–Gleichung

2.1 Radialgleichung der Dirac–Theorie

Die Dirac–Gleichung beschreibt das quantenmechanische Verhalten von relativistischen Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen wie Elektron, Positron und μ-Meson. Um die Vorteile der reellen Clifford Algebra des Minkowski Raumes $\mathcal{G}(1,3)$ ausnutzen zu können, verwende ich die zuerst von David Hestenes [7] eingeführte Hestenes Dirac–Gleichung

$$\hbar\partial\psi i\vec{n} - \frac{q}{c}A\psi = mc\psi\gamma_0 \tag{2.1}$$

Gemäß [8] kann mit $\vec{n} = \vec{\sigma}_2$ und der Koordinatentransformation von kartesischen Koordinaten zu Kugelkoordinaten auf deren Standardkarte eine zur Separation günstige Gleichung produziert werden.

$$\vec{r} = rS\vec{\sigma}_3\tilde{S} \qquad \text{mit} \quad S = e^{-i_3\phi/2}e^{-i_2\vartheta/2} \tag{2.2}$$

Die invariante Ableitung des $\mathbb{E}^3$ läßt sich ausdrücken durch

$$\vec{\partial} = \Omega\vec{\partial}'\Omega^{-1} \tag{2.3}$$

mit

$$\vec{\partial}' = \vec{\sigma}_3\partial_r + \frac{\vec{\sigma}_1}{r}\partial_\vartheta + \frac{\vec{\sigma}_2\partial_\varphi}{r\sin\vartheta} \qquad \Omega r\sqrt{\sin\vartheta} = S \tag{2.4}$$

Führt man noch die Definitionen

$$\partial = \Omega\partial'\Omega^{-1} \qquad \partial' = \gamma_0(\partial_0 + \vec{\partial}') \qquad qA = \gamma_0 V(r) \tag{2.5}$$

ein, so nimmt die Dirac–Gleichung die Gestalt

$$\hbar\partial'\Omega^{-1}\psi i_2 - \frac{1}{c}\gamma_0 V\Omega^{-1}\psi = mc\Omega^{-1}\psi\gamma_0 \tag{2.6}$$

an. Mit dem Separationsansatz

$$\psi(r_0, r, \vartheta, \varphi) = \Omega\psi_1(r, \vartheta) \exp\left\{i_2\left(\lambda\varphi - \frac{Er_0}{\hbar c}\right)\right\} \quad \lambda, E \in \mathbb{R} \tag{2.7}$$

und seinen Separationskonstanten λ und E erhält man eine Gleichung in den Variablen r und ϑ.

$$-\hbar\left(\gamma_3\partial_r + \frac{\gamma_1}{r}\partial_\vartheta\right)\psi_1 i_2 + \frac{\hbar\lambda\gamma_2}{r\sin\vartheta}\psi_1 + \frac{1}{c}\gamma_0(E - V)\psi_1 = mc\psi_1\gamma_0 \tag{2.8}$$

Um den Azimutwinkelanteil vom Radialanteil zu separieren, setzt man

$$\psi_1(r, \vartheta) = \eta(r)g(\vartheta) + i_3\eta(r)f(\vartheta) \qquad i\eta = \eta i \tag{2.9}$$

$$f = f^* = \gamma_0 f\gamma_0 \qquad g = g^* \qquad i_2 f = f i_2 \qquad i_2 g = g i_2 \tag{2.10}$$

Führt man nun noch die Separationskonstante $\varkappa \in \mathbb{R}$ ein, die durch die Beziehung

$$f' i_2 - \frac{\lambda g}{\sin\vartheta} = \varkappa f \qquad g' i_2 + \frac{\lambda f}{\sin\vartheta} = -\varkappa g \tag{2.11}$$

festgelegt ist, so erhält man die Radialgleichung

$$\boxed{-\hbar\gamma_3\partial_r\eta i_2 + \left(\gamma_0\frac{E - V}{c} + \gamma_1\frac{\hbar\varkappa}{r}\right)\eta = mc\eta\gamma_0} \tag{2.12}$$

$\varkappa$ muß aus Normierbarkeitsgründen für f und g eingeschränkt werden auf $\varkappa \in \mathbb{Z} - \{0\}$

2.2 Coulomb–Potential

Die radiale Dirac–Gleichung in reduzierten Größen

$$\lambda = \frac{\hbar}{mc} = 3.8616 \cdot 10^{-11} cm = \text{ Comptonwellenlänge des Elektrons} \tag{2.13}$$

$$\varepsilon = \frac{E}{mc^2} \qquad W = \frac{V}{mc^2} \tag{2.14}$$

kann nach den folgenden leichten algebraischen Umformungen in der $\vec{\sigma}_1$ Ebene (in $\mathcal{G}(1,3)$ ist $\vec{\sigma}_1$ ein Bivektor) geeignet "gedreht" werden.

$$-\lambda\gamma_3\partial_r\eta i_2 + \left(\gamma_0(\varepsilon - W) + \gamma_1\lambda\frac{\varkappa}{r}\right)\eta = \eta\gamma_0 \tag{2.15}$$

Der Übergang der reduzierten Variable $r = \lambda x$ liefert

$$-\gamma_3\partial_x\eta i_2 + \left(\gamma_0(\varepsilon - W) + \gamma_1\frac{\varkappa}{x}\right)\eta = \eta\gamma_0 \qquad \gamma_3|i_2 \tag{2.16}$$

$$-\partial_x \eta + \left(\gamma_3 \gamma_0 (\varepsilon - W) - i_2 \frac{\varkappa}{x} \right) \eta i_2 = \gamma_3 \eta \gamma_0 i_2 \tag{2.17}$$

$$-\partial_x \eta + \left(\vec{\sigma}_3 (\varepsilon - W) - i_2 \frac{\varkappa}{x} \right) \eta i_2 = \gamma_3 \eta \gamma_0 i_2 \tag{2.18}$$

Mit $\vec{\sigma}_3 = -\vec{\sigma}_1 i_2$ erhält man

$$\partial_x \eta + \left(\vec{\sigma}_1 (\varepsilon - W) + \frac{\varkappa}{x} \right) i_2 \eta i_2 = -\gamma_3 \eta \gamma_0 i_2 \tag{2.19}$$

Wegen $\eta^* = \gamma_0 \eta \gamma_0 = -i_2 \eta i_2$ mit $\eta = \eta_0 + \vec{\sigma}_1 \eta_1$, $\eta_{0,1} \in \mathbb{R}$ folgt

$$\partial_x \eta - \left(\vec{\sigma}_1 (\varepsilon - W) + \frac{\varkappa}{x} \right) \eta^* = -\vec{\sigma}_1 \eta \tag{2.20}$$

Definiert man nun, der Idee von Manfred Stein folgend, den gedrehten Spinor χ durch

$$\boxed{\eta = e^{-\vec{\sigma}_1 \beta/2} \chi \qquad \text{const.} = \beta \in \mathbb{R}} \tag{2.21}$$

so erhält man

$$\partial_x e^{-\vec{\sigma}_1 \beta/2} \chi - \left(\vec{\sigma}_1 (\varepsilon - W) + \frac{\varkappa}{x} \right) e^{\vec{\sigma}_1 \beta/2} \chi^* = -\vec{\sigma}_1 e^{-\vec{\sigma}_1 \beta/2} \chi \qquad e^{\vec{\sigma}_1 \beta/2}| \tag{2.22}$$

$$\partial_x \chi - \left(\vec{\sigma}_1 (\varepsilon - W) + \frac{\varkappa}{x} \right) e^{\vec{\sigma}_1 \beta} \chi^* = -\vec{\sigma}_1 \chi \tag{2.23}$$

Wegen $\chi = \chi_0 + \vec{\sigma}_1 \chi_1$, $\chi_{0,1} \in \mathbb{R}$ folgt mit $e^{\vec{\sigma}_1 \beta} = \cosh \beta + \vec{\sigma}_1 \sinh \beta$ eine Zerlegung der Spinorgleichung in zwei Komponenten, wobei als Potential das Coulomb–Potential $W = -\frac{Z\alpha}{x}$ verwendet wird.

$$\begin{aligned}
\partial_x \chi_0 \quad &- \quad \left(\sinh(\beta) \left(\varepsilon + \frac{Z\alpha}{x} \right) + \frac{\varkappa}{x} \cosh(\beta) \right) \chi_0 \\
&+ \quad \left(\cosh(\beta) \left(\varepsilon + \frac{Z\alpha}{x} \right) + \frac{\varkappa}{x} \sinh(\beta) + 1 \right) \chi_1 = 0 && (2.24) \\
\partial_x \chi_1 \quad &- \quad \left(\cosh(\beta) \left(\varepsilon + \frac{Z\alpha}{x} \right) + \frac{\varkappa}{x} \sinh(\beta) - 1 \right) \chi_0 \\
&+ \quad \left(\sinh(\beta) \left(\varepsilon + \frac{Z\alpha}{x} \right) + \frac{\varkappa}{x} \cosh(\beta) \right) \chi_1 = 0 && (2.25)
\end{aligned}$$

Für positive Bindungsenergien $0 < \varepsilon < 1$ kann β speziell festgelegt werden.

$$\varepsilon \cosh \beta = 1 \tag{2.26}$$

Somit ist der χ_1 Anteil homogen im Grad von x. Alternativ könnte auch

$$Z\alpha \cosh \beta + \varkappa \sinh \beta = 0 \tag{2.27}$$

gewählt werden.

$$\Rightarrow \sinh\beta = \sqrt{\cosh^2(\beta) - 1} = \sqrt{\frac{1}{\varepsilon^2} - 1} = \frac{1}{\varepsilon}\sqrt{1-\varepsilon^2} \tag{2.28}$$

Setzt man diese spezielle Wahl für ε ein so erhält man

$$\begin{aligned}\partial_x \chi_0 &- \left(\frac{1}{\varepsilon}\sqrt{1-\varepsilon^2}\left(\varepsilon + \frac{Z\alpha}{x}\right) + \frac{1}{\varepsilon}\frac{\varkappa}{x}\right)\chi_0 \\ &+ \left(\frac{1}{\varepsilon}\left(\varepsilon + \frac{Z\alpha}{x}\right) + \frac{1}{\varepsilon}\sqrt{1-\varepsilon^2}\frac{\varkappa}{x} + 1\right)\chi_1 = 0 \end{aligned}\tag{2.29}$$

$$\begin{aligned}\partial_x \chi_1 &- \left(\frac{1}{\varepsilon}\left(\varepsilon + \frac{Z\alpha}{x}\right) + \frac{1}{\varepsilon}\sqrt{1-\varepsilon^2}\frac{\varkappa}{x} - 1\right)\chi_0 \\ &+ \left(\frac{1}{\varepsilon}\sqrt{1-\varepsilon^2}\left(\varepsilon + \frac{Z\alpha}{x}\right) + \frac{1}{\varepsilon}\frac{\varkappa}{x}\right)\chi_1 = 0 \end{aligned}\tag{2.30}$$

$$\begin{aligned}\partial_x \chi_0 &- \left(\sqrt{1-\varepsilon^2} + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha + \varkappa}{\varepsilon x}\right)\chi_0 \\ &+ \left(2 + \frac{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}{\varepsilon x}\right)\chi_1 = 0 \end{aligned}\tag{2.31}$$

$$\begin{aligned}\partial_x \chi_1 &- \left(\frac{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}{\varepsilon x}\right)\chi_0 \\ &+ \left(\sqrt{1-\varepsilon^2} + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha + \varkappa}{\varepsilon x}\right)\chi_1 = 0 \end{aligned}\tag{2.32}$$

Aus **(2.32)** folgt

$$\chi_0 = \frac{\varepsilon x}{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}\left(\partial_x + \sqrt{1-\varepsilon^2} + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha + \varkappa}{\varepsilon x}\right)\chi_1 \tag{2.33}$$

$$\begin{aligned}\partial_x \chi_0 &= \frac{\varepsilon}{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}\left(\partial_x + \sqrt{1-\varepsilon^2} + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha + \varkappa}{\varepsilon x}\right)\chi_1 \\ &+ x\frac{\varepsilon}{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}\left(\partial_x^2 + \sqrt{1-\varepsilon^2}\partial_x + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha + \varkappa}{\varepsilon x}\partial_x \right. \\ &- \left.\frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha + \varkappa}{\varepsilon x^2}\right)\chi_1 \end{aligned}\tag{2.34}$$

$$\begin{aligned} &= \left[\sqrt{1-\varepsilon^2} + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha + \varkappa}{\varepsilon x}\right]\left[x\frac{\varepsilon}{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}\right. \\ &\quad \left.\cdot\left(\partial_x + \sqrt{1-\varepsilon^2} + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha + \varkappa}{\varepsilon x}\right)\chi_1\right] \\ &- \left(2 + \frac{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}{\varepsilon x}\right)\chi_1 \end{aligned}\tag{2.35}$$

$$
\begin{aligned}
0 &= \frac{\varepsilon}{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}\partial_x\chi_1 \\
&+ \frac{\varepsilon}{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}\left(\sqrt{1-\varepsilon^2} + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha + \varkappa}{\varepsilon x}\right)\chi_1 \\
&+ x\frac{\varepsilon}{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}\partial_x^2\chi_1 + x\frac{\varepsilon\sqrt{1-\varepsilon^2}}{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}\partial_x\chi_1 \\
&+ x\frac{\varepsilon}{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}\frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha + \varkappa}{\varepsilon x}\partial_x\chi_1 \\
&- x\frac{\varepsilon}{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}\frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha + \varkappa}{\varepsilon x^2}\chi_1 \\
&- x\frac{\varepsilon}{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}\left[\sqrt{1-\varepsilon^2} + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha + \varkappa}{\varepsilon x}\right]\partial_x\chi_1 \\
&- x\frac{\varepsilon}{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}\left(\sqrt{1-\varepsilon^2} + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha + \varkappa}{\varepsilon x}\right)^2\chi_1 \\
&+ \left(2 + \frac{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}{\varepsilon x}\right)\chi_1
\end{aligned}
\tag{2.36}
$$

Nach Multiplikation mit $\frac{Z\alpha+\sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}{x\varepsilon}$ erhält man

$$
\begin{aligned}
0 &= \frac{1}{x}\partial_x\chi_1 + \frac{1}{x}\left(\sqrt{1-\varepsilon^2} + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha + \varkappa}{\varepsilon x}\right)\chi_1 \\
&+ \partial_x^2\chi_1 - \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha + \varkappa}{\varepsilon x^2}\chi_1 \\
&- \left(\sqrt{1-\varepsilon^2} + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha + \varkappa}{\varepsilon x}\right)^2\chi_1 + 2\frac{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}{x\varepsilon}\chi_1 \\
&+ \left(\frac{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}{\varepsilon x}\right)^2\chi_1
\end{aligned}
\tag{2.37}
$$

$$
\begin{aligned}
\partial_x^2\chi_1 + \frac{1}{x}\partial_x\chi_1 + \Bigg\{\frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{x} - \left(\sqrt{1-\varepsilon^2} + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha + \varkappa}{\varepsilon x}\right)^2 \\
+2\frac{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}{x\varepsilon} + \left(\frac{Z\alpha\sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}{\varepsilon x}\right)^2\Bigg\}\chi_1 &= 0
\end{aligned}
\tag{2.38}
$$

$$\begin{aligned}\partial_x^2\chi_1+\frac{1}{x}\partial_x\chi_1+\Bigg\{\frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{x}-(1-\varepsilon^2)\\ -2\sqrt{1-\varepsilon^2}\frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha+\varkappa}{\varepsilon x}-\left(\frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha+\varkappa}{\varepsilon x}\right)^2\\ +2\frac{Z\alpha+\sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}{x\varepsilon}+\left(\frac{Z\alpha+\sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}{x\varepsilon}\right)^2\Bigg\}\chi_1 &= 0\end{aligned}\tag{2.39}$$

$$\begin{aligned}\partial_x^2\chi_1+\frac{1}{x}\partial_x\chi_1+\Bigg\{\frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{x}-(1-\varepsilon^2)-\frac{2(1-\varepsilon^2)Z\alpha}{\varepsilon x}+\frac{2Z\alpha}{\varepsilon x}\\ +\frac{(Z\alpha)^2+2Z\alpha\sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa+(1-\varepsilon^2)\varkappa^2}{\varepsilon^2x^2}\\ -\frac{(1-\varepsilon^2)(Z\alpha)^2+2\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha\varkappa+\varkappa^2}{\varepsilon^2x^2}\Bigg\}\chi_1 &= 0\end{aligned}\tag{2.40}$$

$$\begin{aligned}\partial_x^2\chi_1+\frac{1}{x}\partial_x\chi_1+\Bigg\{\frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{x}-(1-\varepsilon^2)+\frac{2\varepsilon Z\alpha}{x}\\ +\frac{\bar\alpha^2+(1-\varepsilon^2)\varkappa^2-(1-\varepsilon^2)\bar\alpha^2-\varkappa^2}{\varepsilon^2x^2}\Bigg\}\chi_1 &= 0\end{aligned}\tag{2.41}$$

$$\partial_x^2\chi_1+\frac{\partial_x\chi_1}{x}+\left\{(\varepsilon^2-1)+\frac{2\varepsilon\bar\alpha+\sqrt{1-\varepsilon^2}}{x}-\frac{\varkappa^2-\bar\alpha^2}{x^2}\right\}\chi_1 = 0 \tag{2.42}$$

Mit dem Ansatz

$$\chi_1=x^{-1/2}g \tag{2.43}$$

kann die Differentialgleichung auf Normalform transformiert werden (vergleiche Anhang).

$$\partial_x^2g+\left\{\frac{1}{4x^2}-(1-\varepsilon^2)+\frac{2\varepsilon\bar\alpha+\sqrt{1-\varepsilon^2}}{x}+\frac{\bar\alpha^2-\varkappa^2}{x^2}\right\}g=0 \tag{2.44}$$

Mit einer linearen Koordinatentransformation kann die Whittaker–Differentialgleichungsform erreicht werden.

$$y=\xi x \quad\Rightarrow\quad \partial_x=\xi\partial_y \quad\Rightarrow\quad \partial_x^2=\xi^2\partial_y^2 \tag{2.45}$$

$$\xi^2\ddot g+\left\{(\varepsilon^2-1)+\frac{2\varepsilon\bar\alpha+\sqrt{1-\varepsilon^2}}{y}\xi+\frac{\bar\alpha^2-\varkappa^2+\frac14}{y^2}\xi^2\right\}g=0 \tag{2.46}$$

$$\ddot g+\left\{\frac{\varepsilon^2-1}{\xi^2}+\frac{2\varepsilon\bar\alpha+\sqrt{1-\varepsilon^2}}{y\xi}+\frac{\bar\alpha^2-\varkappa^2+\frac14}{y^2}\right\}g=0 \tag{2.47}$$

Wählt man nun speziell $4(1-\varepsilon^2)=\xi^2$ bzw. $\xi = 2\sqrt{1-\varepsilon^2}$ so erhält man

$$\boxed{\ddot{g} + \left\{ -\frac{1}{4} + \frac{2\varepsilon\bar{\alpha} + \sqrt{1-\varepsilon^2}}{2y\sqrt{1-\varepsilon^2}} + \frac{\bar{\alpha}^2 - \varkappa^2 + \frac{1}{4}}{y^2} \right\} g = 0} \tag{2.48}$$

Die Lösungen dieser Differentialgleichung lauten nach [17] und [4]

$$\begin{aligned}
g_1 &= M_{k,\mu}(y) = e^{-y/2} y^{-c/2} {}_1F_1(a,c,y) \\
g_2 &= M_{k,-\mu}(y) \\
g_3 &= M_{-k,\mu}(y) \\
g_4 &= M_{-k,-\mu}(-y) \\
g_5 &= W_{k,\mu}(y) = e^{-y/2} y^{c/2} \Psi(a,c,y) \\
g_6 &= W_{k,-\mu}(y) \\
g_7 &= W_{-k,\mu}(-y) \\
g_8 &= W_{-k,-\mu}(-y)
\end{aligned} \tag{2.49}$$

Mit

$$k = \frac{2\varepsilon\bar{\alpha} + \sqrt{1-\varepsilon^2}}{2\sqrt{1-\varepsilon^2}} \tag{2.50}$$

$$\mu = \sqrt{\varkappa^2 - \bar{\alpha}^2} \tag{2.51}$$

$$a = \frac{1}{2} - k + \mu \tag{2.52}$$

$$c = 1 + 2\mu \tag{2.53}$$

falls $c \notin \mathbb{Z}$ gilt [1] (13.1.3)

$$\Psi(a,c,y) = \frac{\Gamma(1-c)}{\Gamma(a-c+1)} {}_1F_1(a,c,y) + \frac{\Gamma(c-1)}{\Gamma(a)} x^{1-c} {}_1F_1(a-c+1, 2-c, y) \tag{2.54}$$

Asymptotisch gilt für $x \to \infty$ [1] (13.1.4) und (13.5.2)

$${}_1F_1(a,c,x) \to \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^x x^{a-c} \left[1 + \mathcal{O}(|x|^{-1}) \right] \tag{2.55}$$

$$\Psi(a,c,x) \to \sum_{n=0}^{N} (-1)^n \frac{(a)_n (a-c+1)_n}{n!} x^{-a-n} + \mathcal{O}(|x|^{-a-N-1}) \tag{2.56}$$

Da die Lösungen g_1 bis g_4 im Unendlichen divergieren und in der Quantenmechanik stets quadratintegrable Lösungen gesucht sind, können diese Funktionen nicht benutzt werden. Die Funktion g_5 hingegen ist im Unendlichen stets exponentiell abfallend und deshalb quadratintegrabel. Über ihr Verhalten am Ursprung ist noch nichts ausgesagt. Betrachtet man reines Coulomb–Feld, so muß die Lösung auch "im Ursprung normierbar" sein.

$$\chi_1(x) = \frac{g_5(y)}{\sqrt{x}} \tag{2.57}$$

$$\chi_0 = \frac{\varepsilon x}{Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}\left(\partial_x + \sqrt{1-\varepsilon^2} + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha + \varkappa}{\varepsilon x}\right)\chi_1(y(x)) \quad (2.58)$$

$y(x) = 2\sqrt{1-\varepsilon^2}x$. Berechnung von $\partial_x \chi_1$:

$$\begin{aligned}\partial_x\chi_1 &= \frac{\partial_x g_5(y(x))}{\sqrt{x}} - \frac{1}{2}\frac{g_5(y(x))}{\sqrt{x}x} = \frac{\partial_x y \partial_y g_5(y)}{\sqrt{x}} - \frac{1}{2}\frac{g_5(y)}{\sqrt{x}x} \\ &= \frac{2\sqrt{1-\varepsilon^2}\partial_y g_5(y)}{\sqrt{x}} - \frac{1}{2}\frac{g_5(y)}{\sqrt{x}x} \end{aligned} \quad (2.59)$$

$$\partial_y \Psi(a,c,y) = -a\Psi(a+1,c+1,y) \quad (2.60)$$

$$\partial_y g_5 = \frac{1}{2}\left(\frac{c}{y} - y\right) g_5(y) - a e^{-y/2} y^{c/2}\Psi(a+1,c+1,y) \quad (2.61)$$

$$\partial_x\chi_1 = \frac{2\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\sqrt{x}}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{c-1}{y} - y\right) g_5(y) - a e^{-y/2} y^{c/2}\Psi(a+1,c+1,y)\right] \quad (2.62)$$

Somit ist der Radialspinor numerisch berechenbar, falls Ψ numerisch berechenbar ist (vergleiche Numerikteil). Zur Herleitung der Sommerfeld–Feinstrukturformel sind die normierbaren Lösungen gesucht, die folgenden Bedingungen genügen müssen

$$k \equiv \frac{2\varepsilon\bar{\alpha} + \sqrt{1-\varepsilon^2}}{2\sqrt{1-\varepsilon^2}} \quad (2.63)$$

$$m^2 \equiv \varkappa^2 - \bar{\alpha}^2 \iff m = \sqrt{\varkappa^2 - \bar{\alpha}^2} \quad (2.64)$$

$$m + \frac{1}{2} - k = -\nu \qquad \nu \in \mathbb{N}_0 \quad (2.65)$$

Normierungsbedingung

$$\sqrt{\varkappa^2 - \bar{\alpha}^2} - \frac{\varepsilon\bar{\alpha}}{\sqrt{1-\varepsilon^2}} = -\nu \quad (2.66)$$

$$\nu + \sqrt{\varkappa^2 - \bar{\alpha}^2} = \frac{\varepsilon\bar{\alpha}}{\sqrt{1-\varepsilon^2}} \quad (2.67)$$

$$\frac{\varepsilon}{\sqrt{1-\varepsilon^2}} = \frac{1}{\bar{\alpha}}\left(\nu + \sqrt{\varkappa^2 - \bar{\alpha}^2}\right) \quad (2.68)$$

Nach Quadrieren und umkehren erhält man

$$\frac{1}{\varepsilon^2} = \left(\frac{\bar{\alpha}}{\nu + \sqrt{\varkappa^2 - \bar{\alpha}^2}}\right)^2 + 1 \quad (2.69)$$

$$\boxed{\varepsilon = \left[1 + \left(\frac{\bar{\alpha}}{\nu + \sqrt{\varkappa^2 - \bar{\alpha}^2}}\right)^2\right]^{-1/2}} \quad (2.70)$$

Feinstrukturformel von Sommerfeld

Kapitel 3

WKB–Verfahren für die Schrödinger–Gleichung

Bevor verschiedene WKB–Verfahren für die Dirac–Gleichung diskutiert werden können, erweist es sich als sinnvoll, typische WKB–Verfahren für die nichtrelativistische Schrödinger–Gleichung genauer zu untersuchen. Für diese ist die WKB–Näherung ursprünglich entwickelt worden. Bei der Untersuchung der WKB–Näherungen an der Schrödinger–Gleichung muß auf die nötige Struktur der zu nähernden Gleichung geachtet werden.

3.1 Globale WKB–Näherung

Die Langer–transformierte [15] radiale Schrödinger–Gleichung lautet

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} e^{2x} \left(E - V(e^x)\right) - \left(l + \frac{1}{2}\right)^2\right] \psi(x) = 0 \tag{3.1}$$

Diese Gleichung hat die Form

$$\left[\partial_x^2 + a(x)\right] \psi(x) = 0 \tag{3.2}$$

Transformiert man diese Gleichung auf eine zweite Differentialgleichung mit

$$\psi(x)\sqrt{z'} = \varphi(z) \qquad z = z(x) \tag{3.3}$$

wobei $z' > 0$ sein muß, um eine bijektive Koordinatentransformation zu garantieren, so erhält man

$$\left[\partial_z^2 + b(z)\right] \varphi(z) = 0 \tag{3.4}$$

Der Zusammenhang zwischen $a(x)$, $b(z)$ und $z(x)$ kann über elementare Rechnungen erhalten werden [14] (S. 18)

$$z'^2 b(z) = a(x) + \sqrt{z'} \left(z'^{-1/2}\right)'' = a(x) - \frac{1}{2} < z; x > \tag{3.5}$$

Die Approximation besteht in der Vernachlässigung der Schwarz–Ableitung $< z; x >$. Um global gültige WKB–Lösungen zu erhalten, wird eine Vergleichsfunktion $b(z)$ gewählt, welche gleich viele Nullstellen entsprechender Ordnung hat wie $a(x)$. Für gebundene Zustände mit zwei klassischen Umkehrpunkten (zwei einfachen Nullstellen) kann der harmonische Oszillator zum Vergleich benutzt werden:

$$b(z) = \varepsilon - z^2 \tag{3.6}$$

Dessen normierbare Lösungen erfüllen die Bedingung

$$\varepsilon = 2\nu + 1 \qquad \nu \in \mathbb{N} \tag{3.7}$$

Aus der genäherten Beziehung

$$z'^2 b(z) = a(x) \tag{3.8}$$

kann leicht die WKB–Quantisierungsbedingung

$$\int_{x_1}^{x_2} dx\, \sqrt{a(x)} = \pi \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \qquad \nu \in \mathbb{N} \tag{3.9}$$

entwickelt werden.

3.2 WKB nach Bertocchi, Fubini und Furlan

3.2.1 WKB–Approximation erster Ordnung

Das WKB–Verfahren nach Bertocchi, Fubini und Furlan [2] hat den Vorteil, daß, ausgehend von der Näherung erster Ordnung, systematisch auch höhere Näherungen berechnet werden können. Da bei diesem Verfahren Reihen in $\hbar$ aufgestellt werden, muß auch eine entsprechende Konstante bei einer Abstraktion berücksichtigt werden. Die Radialgleichung hängt von der **großen** Konstanten λ^{-2} ab die im Folgenden Λ^2 genannt werden soll. Die zu lösende Differentialgleichung hat somit die Gestalt

$$\left\{\partial_x^2 + a(x, \Lambda^2)\right\} \psi(x) = 0 \tag{3.10}$$

wobei sich $a(x, \Lambda^2)$ schreiben läßt als

$$a(x, \Lambda^2) = \Lambda^2 P_0(x) + P_1(x) \tag{3.11}$$

Der wesentliche Schritt der WKB–Näherung ist es nun, eine Koordinatentransformation durchzuführen, die auf eine lösbare Differentialgleichung abbildet, oder zumindest auf eine führt, die durch eine lösbare approximiert werden kann!

$$\frac{dz}{dx} \equiv z'(x) = \alpha(x) \tag{3.12}$$

mit $\alpha(x) > 0$ beliebig. Die Lösungsfunktionen sollen gemäß

$$\phi(z) = \sqrt{z'}\psi(x) \tag{3.13}$$

transformieren. Als ein geeignetes $\alpha(x)$ stellt sich

$$\alpha^2 = \frac{\Lambda^{-2}a(x,\Lambda^2)}{b_0(z)} \tag{3.14}$$

mit

$$b_0(z) = \varepsilon_0 - z^2 \tag{3.15}$$

heraus. Man kann sich bereits hier überlegen, daß α von der Ordnung 1 in Λ^2 ist. Sind x_1 und x_2 die Nullstellen von $a(x,\Lambda^2)$ so folgt sofort aus **(3.14)**

$$\int\limits_{-\sqrt{\varepsilon_0}}^{\sqrt{\varepsilon_0}} dz\, \sqrt{\varepsilon_0 - z^2} = \frac{\pi}{2}\varepsilon_0 = \int\limits_{x_1}^{x_2} dx\, \sqrt{\Lambda^{-2}a(x,\Lambda^2)} \tag{3.16}$$

Die transformierte Differentialgleichung lautet schließlich

$$\left\{\partial_z^2 + \frac{a(x,\Lambda^2)}{\alpha^2} - \frac{< z; x >}{2\alpha^2}\right\}\phi(z) = 0 \tag{3.17}$$

mit der wie folgt definierten **Schwarz–Ableitung**

$$< z; x >= -2z'^{1/2}\left(z'^{-1/2}\right)'' \tag{3.18}$$

Mit **(3.14)** kann $\alpha(x,\Lambda^2)$ durch $b_0(z)$ ersetzt werden:

$$\left\{\partial_z^2 + \Lambda^2 b_0(z) - \frac{< z; x >}{2\alpha^2}\right\}\phi(z) = 0 \tag{3.19}$$

Da die Originalgleichung **(3.10)** von Λ^2 abhängt, möchte man eine exakt lösbare Vergleichsgleichung, in der möglichst auch eine Abhängigkeit von Λ^2 vorkommt. Deshalb werden folgenden Defintionen eingeführt:

$$\begin{aligned} b(z,\Lambda^2) &= b_0(z) + \delta\varepsilon(\Lambda^2) && (3.20)\\ &= \varepsilon_0 - z^2 + \frac{\varepsilon_1}{\Lambda^2} + \frac{\varepsilon_2}{\Lambda^4} + \cdots && (3.21)\\ &= \varepsilon - z^2 && (3.22) \end{aligned}$$

also

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{\varepsilon_1}{\Lambda^2} + \frac{\varepsilon_2}{\Lambda^4} + \cdots \tag{3.23}$$

Somit schreibt sich **(3.19)** als

$$\left\{\partial_z^2 + \Lambda^2 b(z,\Lambda^2) - \Lambda^2\delta\varepsilon(\Lambda^2) - \frac{< z; x >}{2\alpha^2}\right\}\phi(z) = 0 \tag{3.24}$$

Führt man nun noch die Funktion $F(z,\Lambda^2)$ ein

$$F(z,\Lambda^2) = \Lambda^2\delta\varepsilon(\Lambda^2) + \frac{<z;x>}{2\alpha^2} \tag{3.25}$$

$$= \varepsilon_1 + \frac{\varepsilon_2}{\Lambda^2} + \frac{\varepsilon_3}{\Lambda^4} + \cdots + \frac{<z;x>}{2\alpha^2} \tag{3.26}$$

und berücksichtigt man, daß

$$\frac{<z;x>}{2\alpha^2} \tag{3.27}$$

von der Ordnung 1 in Λ^2 ist, so zeichnen sich folgende sinnvolle Definitionen ab:

$$F(z,\Lambda^2) = \underbrace{\left\{\varepsilon_1 + \frac{<z;x>}{2\alpha^2}\right\}}_{f_0} + \underbrace{\varepsilon_2\Lambda^{-2}}_{f_1\Lambda^{-2}} + \underbrace{\varepsilon_3\Lambda^{-4}}_{f_2\Lambda^{-4}} + \cdots \tag{3.28}$$

Abkürzend läßt sich **(3.24)** jetzt schreiben

$$\left\{\partial_z^2 + \Lambda^2 b(z,\Lambda^2) - F(z,\Lambda^2)\right\}\phi(z) = 0 \tag{3.29}$$

Die zugehörige freie Gleichung für $F \equiv 0$ ist exakt lösbar

$$\left\{\partial_z^2 + \Lambda^2 b(z,\Lambda^2)\right\}\phi_0(z) = 0 \tag{3.30}$$

Normierbare Lösungen gibt es nur für

$$\Lambda\varepsilon = 2\nu + 1 \qquad \nu \in \mathbb{N}_0 \tag{3.31}$$

Der Zusammenhang der Lösungen ϕ und ϕ_0 wird nach Rudolf Langer [16] mit folgendem Ansatz hergestellt:

$$\phi(z) = A(z,\Lambda^2)\phi_0(z) + B(z,\Lambda^2)\phi_0'(z) \tag{3.32}$$

wobei man sich A und B in Potenzreihen in Λ^2 entwickelt denkt.

$$A(z,\Lambda^2) = \sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{a_\nu(z)}{\Lambda^{2\nu}} \qquad B(z,\Lambda^2) = \sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{b_\nu(z)}{\Lambda^{2\nu}} \tag{3.33}$$

Benutzt man nur Terme bis $\nu = n$, so ist n der Grad der Approximation. Vergleicht man **(3.29)** mit **(3.30)** in niedrigster Ordnung von Λ^2, so erkennt man, daß $F(z,\Lambda^2)$ in **(3.29)** vernachlässigt werden kann und somit

$$\phi(z) = \phi_0(z) \qquad \text{in niedrigster Ordnung} \tag{3.34}$$

gelten muß. Damit sind jeweils die ersten Koeffizientenfunktionen der Reihen A und B festgelegt:

$$a_0(z) \equiv 1 \qquad b_0(z) \equiv 0 \tag{3.35}$$

Bestimmung der weiteren Koeffizientenfunktionen von A und B

$$\partial_z \phi = A'\phi_0 + A\phi_0' + B'\phi_0' + B\phi_0'' \tag{3.36}$$

$$\partial_z^2 \phi = A''\phi_0 + 2A'\phi_0' + A\phi_0'' + B''\phi_0' + 2B'\phi_0'' + B\phi_0''' \tag{3.37}$$

Aus **(3.30)** ergeben sich sofort die Beziehungen

$$\phi_0'' + \Lambda^2 b\phi_0 = 0 \qquad \phi_0''' = -\Lambda^2 \left[b'\phi_0 + b\phi_0'\right] \tag{3.38}$$

Einsetzen von **(3.37)** und **(3.38)** in **(3.29)** liefert

$$\begin{aligned} A''\phi_0 + 2A'\phi_0' &- A\Lambda^2 b\phi_0 + B''\phi_0' - 2B'\Lambda^2 b\phi_0 - B\Lambda^2\left[b'\phi_0 + b\phi_0'\right] \\ &+ \Lambda^2 bA\phi_0 + \Lambda^2 bB\phi_0' - FA\phi_0 - FB\phi_0' = 0 \end{aligned} \tag{3.39}$$

$$\Big[A'' - 2B'\Lambda^2 b - B\Lambda^2 b' - FA\Big]\phi_0 + \left[2A' + B'' - FB\right]\phi_0' = 0 \tag{3.40}$$

Dazu äquivalent ist, das folgende Gleichungssystem zu betrachten

$$A'' - 2B'\Lambda^2 b - B\Lambda^2 b' - FA = 0 \tag{3.41}$$

$$2A' + B'' - FB = 0 \tag{3.42}$$

Daraus folgt

$$A(z,\Lambda^2) = \frac{1}{2}\int\limits_{z_1}^{z}\left[FB - B''\right]dz + C_A \tag{3.43}$$

Ebenso folgt mit

$$2b^{1/2}\partial_z b^{1/2} B = b'B + 2bB' \tag{3.44}$$

aus **(3.41)**

$$B(z,\Lambda^2) = \frac{b^{-1/2}}{2\Lambda^2}\int\limits_{z_1}^{z} b^{-1/2}\left[A'' - FA\right]dz + C_B \tag{3.45}$$

Aus Konsistenzgründen zu **(3.35)** müssen die Integrationskonstanten C_A und C_B festgelegt werden durch

$$C_A = 1 \qquad C_B = 0 \tag{3.46}$$

In niedrigster Ordnung ist $\varepsilon = \varepsilon_0$ und $\phi(z) = \phi_0(z)$ (vergleiche **(3.34)**). Deshalb ist für $\Lambda\varepsilon = 2\nu + 1$ außer ϕ_0 auch ϕ normierbar. Deshalb folgt mit **(3.34)**, **(3.31)** und **(3.16)** die bekannte **WKB–Quantisierungsbedingung**

$$\frac{\pi}{2}\varepsilon_0 = \frac{\pi}{2}\varepsilon = \frac{\pi}{2}\frac{2\nu+1}{\Lambda} = \int\limits_{x_1}^{x_2} dx\,\sqrt{\Lambda^{-2}a(x,\Lambda^2)} \quad \nu \in \mathbb{N}_0 \tag{3.47}$$

$$\boxed{\pi\left(\nu + \frac{1}{2}\right) = \int\limits_{x_1}^{x_2} dx\,\sqrt{a(x,\Lambda^2)} \quad \nu \in \mathbb{N}_0} \tag{3.48}$$

3.2.2 WKB–Näherungen höherer Ordnung

Führt man abkürzend

$$C = \frac{1}{2\Lambda^2} \int_{z_1}^{z} b^{-1/2} \left[A'' - FA\right] dz \tag{3.49}$$

ein, so stellt man fest, daß $B(z)$ im allgemeinen Pole bei z_1 und z_2 (Nullstellen von b(z)) hat.

$$B(z) = \frac{C(z)}{\sqrt{b(z)}} \tag{3.50}$$

Die Pole in B verschwinden nur, wenn

$$C(z_2) = 0 = \int_{z_1}^{z_2} b^{-1/2} \left[A'' - FA\right] dz \tag{3.51}$$

Diese Forderung legt sukzessive die höheren Korrekturen zu ε_0 fest.

Berechnung von ε_1

Setzt man in **(3.51)** nur Terme der niedrigsten Ordnung ein, so erhält man

$$\int_{-\sqrt{\varepsilon_0}}^{\sqrt{\varepsilon_0}} b_0^{-1/2} f_0 = \int_{-\sqrt{\varepsilon_0}}^{\sqrt{\varepsilon_0}} b_0^{-1/2} \left[\varepsilon_1 + \frac{< z; x >}{2\alpha^2}\right] dz \tag{3.52}$$

$$\Longleftrightarrow \varepsilon_1 \int_{-\sqrt{\varepsilon_0}}^{\sqrt{\varepsilon_0}} \frac{dz}{\sqrt{\varepsilon_0 - z^2}} = -\frac{1}{2} \int_{-\sqrt{\varepsilon_0}}^{\sqrt{\varepsilon_0}} b_0^{-1/2} \frac{< z; x >}{\alpha^2} dz \tag{3.53}$$

Elementare Integrationsregeln liefern

$$\int \frac{dz}{\sqrt{\varepsilon_0 - z^2}} = \arcsin\left(\frac{z}{\sqrt{\varepsilon_0}}\right) \tag{3.54}$$

$$\int_{-\sqrt{\varepsilon_0}}^{\sqrt{\varepsilon_0}} \frac{dz}{\sqrt{\varepsilon_0 - z^2}} = \pi \tag{3.55}$$

Somit erhält man für ϵ_1

$$\varepsilon_1 = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\sqrt{\varepsilon_0}}^{\sqrt{\varepsilon_0}} b_0^{-1/2} \frac{< z; x >}{\alpha^2} dz = -\frac{\Lambda}{2\pi} \int_{x_1}^{x_2} \frac{< z; x >}{\sqrt{a(x, \Lambda^2)}} dx \tag{3.56}$$

Prinzipiell kann **(3.48)** verallgemeinert werden durch

$$\Lambda\varepsilon = 2\nu + 1 = \Lambda\left(\varepsilon_0 + \frac{\varepsilon_1}{\Lambda^2} + \frac{\varepsilon_2}{\Lambda^4} + \cdots\right) \tag{3.57}$$

$$\Rightarrow \varepsilon_0 = \frac{2\nu+1}{\Lambda} - \frac{\varepsilon_1}{\Lambda^2} - \frac{\varepsilon_2}{\Lambda^4} - \cdots \tag{3.58}$$

$$\frac{\pi}{2}\varepsilon_0 = \frac{\pi}{2}\frac{2\nu+1}{\Lambda} - \frac{\varepsilon_1\pi}{2\Lambda^2} - \frac{\varepsilon_2\pi}{2\Lambda^4} - \cdots = \int_{x_1}^{x_2} dx\, \sqrt{\Lambda^{-2}a(x,\Lambda^2)} \tag{3.59}$$

$$\boxed{\pi\left(\nu + \frac{1}{2}\right) = \int_{x_1}^{x_2} dx\, \sqrt{a(x,\Lambda^2)} + \frac{\varepsilon_1\pi}{2\Lambda} + \frac{\varepsilon_2\pi}{2\Lambda^3} + \cdots} \tag{3.60}$$

Es muß aber stets darauf geachtet werden, daß für die betrachtete Ordnung auch ϕ normierbar bleibt! Mit $\Lambda\varepsilon = 2\nu+1$ ist nur ϕ_0 normierbar. Es muß kontrolliert werden, ob $\phi = A(x,\Lambda^2)\phi_0 + B(x,\lambda^2)\phi_0'$ normierbar ist, wenn ϕ_0 es ist.

Um die Korrektur ε_1 zu berechnen, werden nur die nullten Koeffizientenfunktionen von A und B benutzt, die die Normierbarkeit von ϕ garantieren!

Als neue Quantenbedingung mit erster Korrektur erhält man nun

$$\boxed{\pi\left(\nu + \frac{1}{2}\right) = \int_{x_1}^{x_2} dx\, \sqrt{a(x,\Lambda^2)} - \frac{1}{4}\int_{x_1}^{x_2} \frac{< z; x >}{\sqrt{a(x,\Lambda^2)}} dx} \tag{3.61}$$

Erste Korrektur ohne Schwarz–Ableitung

Die Zielsetzung ist, eine Korrektur

$$\varepsilon_1 = -\frac{\Lambda}{2\pi}\int_{x_1}^{x_2} \frac{< z; x >}{\sqrt{a(x)}} dx \tag{3.62}$$

zu erhalten, die keine Schwarz–Ableitung mehr enthält. Die Schwarz–Ableitung läßt sich schreiben als

$$\begin{aligned} < z; x > &= -2\left(\frac{a(x)}{b_0(z(x))}\right)^{1/4} \partial_x^2 \left(\frac{b_0(z(x))}{a(x)}\right)^{1/4} \\ &\overset{QMI}{=} -2\left[a^{1/4}\partial_x^2 a^{-1/4} - \frac{a}{b} b^{1/4}\partial_z^2 b^{-1/4}\right] \end{aligned} \tag{3.63}$$

$$\varepsilon_1 = \frac{\Lambda}{\pi}\int_{x_1}^{x_2} \frac{a^{1/4}\partial_x^2 a^{-1/4} - \sqrt{\frac{a}{b}}\frac{dz}{dx} b^{1/4}\partial_z^2 b^{-1/4}}{\sqrt{a}} dx \tag{3.64}$$

$$\varepsilon_1 = \frac{\Lambda}{\pi} \int_{x_1}^{x_2} a^{-1/4} \partial_x^2 a^{-1/4} dx - \frac{\Lambda}{\pi} \int_{z_1}^{z_2} b^{-1/4} \partial_z^2 b^{-1/4} dz \tag{3.65}$$

Das zweite Integral kann konkret berechnet werden da b explizit bekannt ist.

$$b(z) = \varepsilon - z^2 \tag{3.66}$$

$$\int_{z_1}^{z_2} b^{-1/4} \partial_z^2 b^{-1/4} dz = \int_{z_1}^{z_2} b^{-3/2} \left[\frac{5}{16} b^{-1} 4z^2 + \frac{1}{2} \right] dz \tag{3.67}$$

Analoge Überlegungen, wie sie in [5], Kapitel VI, §6, (7)ff ausgeführt sind, zeigen, daß obiges Integral auch als Umlaufintegral in der komplexen Ebene um die Verzweigungslinie – von z_1 nach z_2 – geschrieben werden kann. Da außerhalb dieser Verzweigungslinie keine weiteren Singularitäten mehr vorhanden sind, kann der Integralweg ins Unendliche ausgedehnt werden. Dort verschwindet aber der Integrand. Somit ist gezeigt, daß das zweite Integral verschwindet. Als Korrektur bleibt also nur das Integral

$$\varepsilon_1 = \frac{\Lambda}{\pi} \int_{x_1}^{x_2} a^{-1/4} \partial_x^2 a^{-1/4} dx \tag{3.68}$$

Kapitel 4

WKB–Verfahren für die Dirac–Gleichung

Im vorherigen Kapitel ist klar geworden, daß ein analoges WKB–Verfahren wie in der Schrödinger–Theorie nur dann in der Dirac–Theorie angewandt werden kann, wenn es gelingt, die radiale Dirac–Gleichung in eine Differentialgleichung zweiter Ordnung in Normalform zu bringen. Damit hat die radiale Dirac–Gleichung die gleiche Form wie die Radialgleichung der Schrödinger–Theorie.

Dieses Problem ist in der Literatur mit verschiedenen Methoden gelöst worden. Im Wesentlichen besteht das Problem in der Entkopplung der radialen Dirac–Gleichung. Die Entkopplung selbst wird oft bereits nur mit Näherungen durchgeführt um für das Coulomb–Potential befriedigende Ergebnisse zu erhalten. In diesem Kapitel diskutiere ich verschiedene Näherungsverfahren, die ich aufbauend auf bereits Existierenden entwickelt habe. Es wird sich zeigen, daß es wesentlich ist wie die Entkopplung der Radialgleichung durchgeführt wird.

4.1 WKB–G Die Good–Näherung an der Dirac–Gleichung

Das Ziel der modifizierten WKB–Näherung von R. H. Good [10] ist, eine allgemein gültige Näherungsformel zu finden, welche durch entsprechende Limes-Betrachtungen die Näherungsformel der Dirac–Gleichung in die Näherungsformel der Schrödinger - Gleichung überführt. Ferner soll eine WKB–Näherung entstehen, welche für das Coulomb–Potential exakte Ergebnisse liefert.

4.1.1 Dirac–Analogon zur Schrödinger–Radialgleichung

Die radiale Dirac–Gleichung kann in ein Gleichungssystem mit zwei reellen Komponenten zerlegt werden [8].

$$\begin{aligned} \hbar c \partial_r \eta_1 &= -\frac{\hbar c \varkappa}{r}\eta_1 + (E - mc^2 - V)\eta_0 && (4.1) \\ \hbar c \partial_r \eta_0 &= (V - E - mc^2)\eta_1 + \frac{\hbar c \varkappa}{r}\eta_0 && (4.2) \end{aligned}$$

Nachdem die eine Gleichung nach der kleinen Komponente η_1 aufgelöst wurde, kann diese Komponente in der anderen Gleichung eliminiert werden.

$$\eta_1 = \frac{\hbar c}{V - E - mc^2}\left[\partial_r \eta_0 - \frac{\varkappa}{r}\eta_0\right] \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} \partial_r \eta_1 &= -\frac{V'\hbar c}{(V - E - mc^2)^2}\left[\partial_r \eta_0 - \frac{\varkappa}{r}\eta_0\right] \\ &+ \frac{\hbar c}{V - E - mc^2}\left[\partial_r^2 \eta_0 + \frac{\varkappa}{r^2}\eta_0 - \frac{\varkappa}{r}\partial_r \eta_0\right] && (4.4) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\frac{E - mc^2 - V}{\hbar c}\eta_0 + \frac{V'\hbar c}{(V - E - mc^2)^2}\left[\partial_r \eta_0 - \frac{\varkappa}{r}\eta_0\right] \\ &\quad -\frac{\hbar c}{V - E - mc^2}\left[\partial_r^2 \eta_0 + \frac{\varkappa}{r^2}\eta_0 - \frac{\varkappa}{r}\partial_r \eta_0\right] \\ &\quad\quad -\frac{\varkappa}{r}\frac{\hbar c}{V - E - mc^2}\left[\partial_r \eta_0 - \frac{\varkappa}{r}\eta_0\right] = 0 && (4.5) \end{aligned}$$

Nach Multiplizieren mit $\frac{V-E-mc^2}{\hbar c}$ erhält man

$$\begin{aligned} &\frac{(E - V - mc^2)(V - E - mc^2)}{\hbar^2 c^2}\eta_0 + \frac{V'}{V - E - mc^2}\left[\partial_r \eta_0 - \frac{\varkappa}{r}\eta_0\right] \\ &\quad -\partial_r^2 \eta_0 - \frac{\varkappa}{r^2}\eta_0 + \frac{\varkappa}{r}\partial_r \eta_0 - \frac{\varkappa}{r}\partial_r \eta_0 + \frac{\varkappa^2}{r^2}\eta_0 = 0 && (4.6) \end{aligned}$$

Mit der Definition $p^2(r)c^2 = (E - V(r))^2 - m^2c^4$ erhält man

$$\begin{aligned} &-\frac{p^2}{\hbar^2}\eta_0 - \frac{V'}{V - E - mc^2}\frac{\varkappa}{r}\eta_0 - \frac{\varkappa}{r^2}\eta_0 + \frac{\varkappa^2}{r^2}\eta_0 \\ &\quad +\frac{V'}{V - E - mc^2}\partial_r \eta_0 - \partial_r^2 \eta_0 = 0 && (4.7) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\Longleftrightarrow \partial_r^2 \eta_0 + \frac{V'}{E - V + mc^2}\partial_r \eta_0 \\ &+ \left[\frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{\varkappa(\varkappa - 1)}{r^2} - \frac{V'}{E - V + mc^2}\frac{\varkappa}{r}\right]\eta_0 = 0 && (4.8) \end{aligned}$$

Führt man noch $\phi = E - V + mc^2$ ein, so reduziert sich die Formel auf

$$\partial_r^2 \eta_0 - \frac{\phi'}{\phi}\partial_r \eta_0 + \left[\frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{\varkappa(\varkappa - 1)}{r^2} + \frac{\phi'}{\phi}\frac{\varkappa}{r}\right]\eta_0 = 0 \tag{4.9}$$

Dirac–Analogon zur Schrödinger–Radialgleichung

Für den nichtrelativistischen Fall $c \to \infty \iff \phi^{-1} \to 0$ erhält man die Schrödinger–Radialgleichung

$$\partial_r^2 \eta_0 + \left[\frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{\varkappa(\varkappa - 1)}{r^2}\right]\eta_0 = 0 \tag{4.10}$$

4.1.2 Bessel - Funktionen — die $V = 0$ Lösungen

Es soll nun versucht werden, die erhaltene Differentialgleichung, für den potentialfreien Fall auf die Form der Bessel Differentialgleichung zu bringen. Die Bessel Differentialgleichung lautet

$$x^2 y'' + xy' + (x^2 - n^2)y = 0 \tag{4.11}$$

Die zu untersuchende physikalische Gleichung resultiert aus der radialen Dirac–Gleichung und ist deshalb auf $0 \leq r \leq \infty$ definiert. Da die Variable nicht Null wird, darf durch x^2 dividiert werden.

$$\iff y'' + \frac{y'}{x} + \left(1 - \frac{n^2}{x^2}\right) y = 0 \tag{4.12}$$

Für den potentialfreien Fall geht Gleichung (4.9) in

$$\partial_r^2 \eta_0 + \left[\frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{\varkappa(\varkappa - 1)}{r^2}\right]\eta_0 = 0 \tag{4.13}$$

über, wobei $p^2c^2 = E^2 - m^2c^4$ nicht mehr vom Ort abhängt. Nachdem die Transformation

$$\eta_0 = \sqrt{r}\Sigma \tag{4.14}$$

$$\Rightarrow \partial_r \eta_0 = \frac{\Sigma}{2\sqrt{r}} + \sqrt{r}\partial_r \Sigma \tag{4.15}$$

$$\Rightarrow \partial_r^2 \eta_0 = \sqrt{r}\partial_r^2 \Sigma + \frac{\partial_r \Sigma}{\sqrt{r}} - \frac{\Sigma}{4r\sqrt{r}} \tag{4.16}$$

ausgeführt ist, erhält man

$$\sqrt{r}\partial_r^2 \Sigma + \frac{\partial_r \Sigma}{\sqrt{r}} - \frac{\Sigma}{4r\sqrt{r}} + \left[\frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{\varkappa(\varkappa - 1)}{r^2}\right]\sqrt{r}\Sigma = 0 \tag{4.17}$$

$$\Longleftrightarrow \partial_r^2\Sigma + \frac{\partial_r\Sigma}{r} - \frac{\Sigma}{4r^2} + \left[\frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{\varkappa(\varkappa-1)}{r^2}\right]\Sigma = 0 \tag{4.18}$$

$$\Longleftrightarrow \partial_r^2\Sigma + \frac{\partial_r\Sigma}{r} + \left[\frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{\varkappa(\varkappa-1)+1/4}{r^2}\right]\Sigma = 0 \tag{4.19}$$

$$\Longleftrightarrow \partial_r^2\Sigma + \frac{\partial_r\Sigma}{r} + \left[\frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{(\varkappa-1/2)^2}{r^2}\right]\Sigma = 0 \tag{4.20}$$

Setzt man noch

$$y = pr/\hbar \tag{4.21}$$

$$\Rightarrow \partial_y\Sigma = \frac{\partial r}{\partial y}\partial_r\Sigma \tag{4.22}$$

$$\Rightarrow \partial_y^2 = \frac{\hbar^2}{p^2}\partial_r^2\Sigma \tag{4.23}$$

so transformiert sich die Differentialgleichung zu

$$\frac{p^2}{\hbar^2}\partial_y^2\Sigma + \frac{p^2}{\hbar^2}\frac{\partial_y\Sigma}{y} + \left[\frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{(\varkappa-1/2)^2}{y^2}\frac{p^2}{\hbar^2}\right]\Sigma = 0 \tag{4.24}$$

$$\Longleftrightarrow \partial_y^2\Sigma + \frac{\partial_y\Sigma}{y} + \left[1 - \frac{(\varkappa-1/2)^2}{y^2}\right]\Sigma = 0 \tag{4.25}$$

Dies ist die Bessel Differentialgleichung mit der Lösung

$$\Sigma = \mathcal{J}_{\varkappa-1/2}(y) = \mathcal{J}_{\varkappa-1/2}\left(\frac{pr}{\hbar}\right) \tag{4.26}$$

Somit ist

$$\eta_0 = \sqrt{\frac{pr}{\hbar}}\mathcal{J}_{\varkappa-1/2}\left(\frac{pr}{\hbar}\right) \tag{4.27}$$

eine Lösung der Gleichung (4.13).

4.1.3 Ein Lösungsansatz für $V \neq 0$

Als Lösungsansatz für die Gleichung (4.9) mit $V \neq 0$ wird

$$\eta_0 = T(r)\mathcal{J}(S(r)) \tag{4.28}$$

benutzt.

$$\partial_r\eta_0 = T'\mathcal{J} + T\mathcal{J}' \tag{4.29}$$

$$\partial_r^2 \eta_0 = T'' \mathcal{J}(S(r)) + 2T'\mathcal{J}' + T\mathcal{J}'' \tag{4.30}$$

Dabei bedeutet $' = \frac{\partial}{\partial r}$. Die Differentialgleichung für die Funktionen T und S lautet

$$\begin{aligned} T''\mathcal{J} + 2T'\mathcal{J}' + T\mathcal{J}'' - \frac{\phi'}{\phi}\left[T'\mathcal{J} + T\mathcal{J}'\right] & \\ + \left[\frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{\varkappa(\varkappa-1)}{r^2} + \frac{\phi'}{\phi}\frac{\varkappa}{r}\right] T\mathcal{J} &= 0 \end{aligned} \tag{4.31}$$

Zur weiteren Berechnung müssen noch einige Nebenrechnungen durchgeführt werden.

$$\partial_r \mathcal{J}(S) = S'\partial_S \mathcal{J} \tag{4.32}$$

$$\begin{aligned} \partial_r^2 \mathcal{J}(S) &= \partial_r \left[\partial_r S \partial_S \mathcal{J}(S)\right] \\ &= (\partial_r^2 S)\partial_S \mathcal{J}(S) + (\partial_r S)\partial_r\partial_S \mathcal{J}(S) \\ &= (\partial_r^2 S)\partial_S \mathcal{J}(S) + (\partial_r S)\partial_S\partial_r \mathcal{J}(S) \\ &= (\partial_r^2 S)\partial_S \mathcal{J}(S) + (\partial_r S)(\partial_r S)\partial_S^2 \mathcal{J}(S) \\ &= (\partial_r^2 S)\partial_S \mathcal{J}(S) + (\partial_r S)^2\partial_S^2 \mathcal{J}(S) \end{aligned} \tag{4.33}$$

$\mathcal{J}(S)$ genügt der Bessel Differentialgleichung. Deshalb kann die zweite Ableitung nach S durch erste und nullte Ableitungen der Bessel - Funktionen ausgedrückt werden, denn

$$S^2\partial_S^2\mathcal{J} + S\partial_S\mathcal{J} + \left(S^2 - \left(\varkappa - \frac{1}{2}\right)^2\right)\mathcal{J} = 0 \tag{4.34}$$

$$\Rightarrow \partial_S^2\mathcal{J} = -\frac{\partial_S\mathcal{J}}{S} - \left(1 - \left(\frac{\varkappa - \frac{1}{2}}{S}\right)^2\right)\mathcal{J} \tag{4.35}$$

Somit erhält man als Differntialgleichung für die Funktionen T und S

$$\begin{aligned} \frac{T''}{T}\eta_0 + \left[2\frac{T'}{T} - \frac{\phi'}{\phi}\right] T\mathcal{J}' + T\left[(\partial_r^2 S)\partial_S\mathcal{J} + (\partial_r S)^2\partial_S^2\mathcal{J}\right] & \\ -\frac{\phi'}{\phi}\frac{T'}{T}\eta_0 + \left[\frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{\varkappa(\varkappa-1)}{r^2} + \frac{\phi'}{\phi}\frac{\varkappa}{r}\right]\eta_0 &= 0 \end{aligned} \tag{4.36}$$

$$\begin{aligned} \Longleftrightarrow \left[2\frac{T'}{T} - \frac{\phi'}{\phi} + \frac{S''}{S'}\right] T\mathcal{J}' + T(\partial_r S)^2\partial_S^2\mathcal{J} & \\ + \left[\frac{T''}{T} - \frac{\phi' T'}{\phi T} + \frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{\varkappa(\varkappa-1)}{r^2} + \frac{\phi'\varkappa}{\phi r}\right]\eta_0 &= 0 \end{aligned} \tag{4.37}$$

$$\iff \left[2\tfrac{T'}{T} - \tfrac{\phi'}{\phi} + \tfrac{S''}{S'}\right] T\mathcal{J}' - T(\partial_r S)^2 \left[\tfrac{\partial_S \mathcal{J}}{S} + \left(1 - \left(\tfrac{\varkappa - \frac{1}{2}}{S}\right)^2\right)\mathcal{J}\right]$$
$$+ \left[\tfrac{T''}{T} - \tfrac{\phi' T'}{\phi T} + \tfrac{p^2}{\hbar^2} - \tfrac{\varkappa(\varkappa-1)}{r^2} + \tfrac{\phi'\varkappa}{\phi r}\right]\eta_0 = 0 \tag{4.38}$$

$$\iff \left[2\tfrac{T'}{T} - \tfrac{\phi'}{\phi} + \tfrac{S''}{S'} - \tfrac{S'}{S}\right] T\mathcal{J}' + \left[\tfrac{T''}{T} - \tfrac{\phi' T'}{\phi T} + \tfrac{p^2}{\hbar^2} - \tfrac{\varkappa(\varkappa-1)}{r^2}\right.$$
$$\left. + \tfrac{\phi'\varkappa}{\phi r} - (\partial_r S)^2 \left(1 - \left(\tfrac{\varkappa - \frac{1}{2}}{S}\right)^2\right)\right]\eta_0 = 0 \tag{4.39}$$

Wähle nun Œ

$$T = \sqrt{\frac{\phi S}{S'}} \tag{4.40}$$

$$\Rightarrow T' = \frac{1}{2\sqrt{\frac{\phi S}{S'}}} \frac{\phi' S S' + \phi S'^2 - \phi S S''}{S'^2} \tag{4.41}$$

$$\Rightarrow 2\frac{T'}{T} = \frac{\phi' S S' + \phi S'^2 - \phi S S''}{\phi S S'} \tag{4.42}$$

Folglich gilt

$$2\frac{T'}{T} - \frac{\phi'}{\phi} + \frac{S''}{S'} - \frac{S'}{S} = 0 \tag{4.43}$$

Da η_0 wegen der Normierbarkeit nicht identisch verschwindet, gilt

$$\frac{T''}{T} - \frac{\phi' T'}{\phi T} - S'^2 \left(1 - \left(\frac{\varkappa - \frac{1}{2}}{S}\right)^2\right) + \frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{\varkappa(\varkappa - 1)}{r^2} + \frac{\phi'\varkappa}{\phi r} = 0 \tag{4.44}$$

4.1.4 Eine semiklassische Näherung

$$f(S, S', S'') = g(r, \hbar) \tag{4.45}$$

Obige Gleichung bestimmt die Funktion $S(r)$. Da die Gleichung von $\hbar$ abhängt, wird die Funktion $S(r)$ dies auch tun. Unter der Annahme, daß die Abhängigkeit der Funktion S von $\hbar$ in eine Potenzreihe in $\hbar$ entwickelbar ist, können die führenden Glieder dieser Potenzreihe als Approximation für die Funktion benutzt werden. Durch Vergleich mit der Lösung für den potentialfreien Fall erkennt man, daß als führende Potenz $\hbar^{-1}$ sinnvoll ist.

$$S = \frac{1}{\hbar}\sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n S_n \tag{4.46}$$

Die semiklassische Approximation berücksichtigt nur die ersten beiden führenden Potenzen in $\hbar$ der Funktion $f(S,S',S'')$ in Gleichung (4.45). Das heißt alle Terme der Ordnung $\hbar^{-2}$ und $\hbar^{-1}$.

$$\mathcal{O}\left(\frac{T''}{T}\right) = 1 \qquad \mathcal{O}\left(\frac{\phi' T'}{\phi T}\right) = 1 \tag{4.47}$$

Die Gleichung, welche schließlich die Funktion $S(r)$ in semiklassischer Näherung bestimmt lautet

$$S'^2\left(1-\left(\frac{\varkappa-\frac{1}{2}}{S}\right)^2\right) = \frac{p^2}{\hbar^2}-\frac{\varkappa^2}{r^2}+\frac{\varkappa}{r^2}+\frac{\phi'\varkappa}{\phi r} \tag{4.48}$$

Unter der Annahme $\mathcal{O}(\varkappa) = \hbar^{-1}$ liefert das Ordnen nach Potenzen in $\hbar$

$$(S')^2\left(1-\frac{\varkappa^2}{S^2}\right)+\varkappa\left(\frac{S'}{S}\right)^2 = \left(\frac{p^2}{\hbar^2}-\frac{\varkappa^2}{r^2}\right)+\frac{\varkappa}{r^2}+\frac{\phi'\varkappa}{\phi r} \tag{4.49}$$

$$(S')^2\left[(1-\varkappa^2 S^{-2})+\varkappa S^{-2}\right] = \frac{p^2}{\hbar^2}-\frac{\varkappa^2}{r^2}+\frac{\varkappa}{r^2}+\frac{\phi'\varkappa}{\phi r} \tag{4.50}$$

$$S'\left[(1-\varkappa^2 S^{-2})+\varkappa S^{-2}\right]^{1/2} = \sqrt{\frac{p^2}{\hbar^2}-\frac{\varkappa^2}{r^2}+\frac{\varkappa}{r^2}+\frac{\phi'\varkappa}{\phi r}} \tag{4.51}$$

Entwickelt man nun die Wurzel gemäß

$$\sqrt{a+x} \approx \sqrt{a}+\frac{x}{2\sqrt{a}} \tag{4.52}$$

so erhält man

$$S'\left\{\sqrt{1-\frac{\varkappa^2}{S^2}}+\frac{\varkappa}{2S\sqrt{S^2-\varkappa^2}}\right\} = \sqrt{\frac{p^2}{\hbar^2}-\frac{\varkappa^2}{r^2}}+\varkappa\frac{1+r\frac{\phi'}{\phi}}{2\sqrt{\frac{p^2r^2}{\hbar^2}-\varkappa^2}} \tag{4.53}$$

Untersucht man die Polstellen dieser Differentialgleichung, so können zwei Funktionswerte der Funktion $S(r)$ direkt abgelesen werden:

$$S(r_1) = -\varkappa \qquad S(r_2) = \varkappa \tag{4.54}$$

wobei r_1 und r_2 die Nullstellen

$$\frac{p^2}{\hbar^2}-\frac{\varkappa^2}{r_{1,2}^2} = 0 \tag{4.55}$$

sind. Mit diesen Informationen kann die Differentialgleichung integriert werden.

$$\begin{aligned}
&\int_{-\varkappa}^{\varkappa}\frac{d\sigma}{\sigma}\,\sqrt{\sigma^2-\varkappa^2} \quad + \quad \frac{\varkappa}{2}\int_{-\varkappa}^{\varkappa}\frac{d\sigma}{\sigma}\,\frac{1}{\sqrt{\sigma^2-\varkappa^2}} \\
&= \int_{r_1}^{r_2} dr\,\sqrt{\frac{p^2}{\hbar^2}-\frac{\varkappa^2}{r^2}} \quad + \quad \frac{\varkappa}{2}\int_{r_1}^{r_2} dr\,\frac{1+r\frac{\phi'}{\phi}}{r\sqrt{\frac{p^2r^2}{\hbar^2}-\varkappa^2}}
\end{aligned} \tag{4.56}$$

Die Berechnung der Integrale auf der linken Seite kann explizit durchgeführt werden

$$\int_{-\varkappa}^{\varkappa} d\sigma \sqrt{1-\frac{\varkappa^2}{\sigma^2}} = \left\{\sqrt{\sigma^2-\varkappa^2} - \varkappa \arccos\left(\frac{\varkappa}{\sigma}\right)\right\}\Big|_{-\varkappa}^{\varkappa}$$
$$= \varkappa(\pi + 2\pi n) \quad n \in \mathbb{Z} \tag{4.57}$$

$$\int_{-\varkappa}^{\varkappa} \frac{d\sigma}{\sigma} \frac{1}{\sqrt{\sigma^2-\varkappa^2}} = \frac{1}{\varkappa} \arccos\left(\frac{\varkappa}{x}\right)\Big|_{-\varkappa}^{\varkappa} = -\frac{\pi + 2\pi n'}{\varkappa} \quad n' \in \mathbb{Z} \tag{4.58}$$

Unter Berücksichtigung, daß die rechte Seite immer positiv ist und mit

$$\int_{-\varkappa}^{\varkappa} \frac{d\sigma}{\sigma} \sqrt{\sigma^2-\varkappa^2} + \frac{\varkappa}{2}\int_{-\varkappa}^{\varkappa} \frac{d\sigma}{\sigma} \frac{1}{\sqrt{\sigma^2-\varkappa^2}} = \varkappa(\pi+2\pi n) - \frac{\pi}{2} - 2\pi n'$$
$$= \pi\left(\nu + \frac{1}{2}\right) \quad \nu \in \mathbb{N} \tag{4.59}$$

erhält man als WKB–Quantisierungsbedingung

$$\boxed{\int_{r_1}^{r_2} dr \sqrt{\frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{\varkappa^2}{r^2}} + \frac{\varkappa}{2}\int_{r_1}^{r_2} dr \frac{1 + r\frac{\phi'}{\phi}}{r\sqrt{\frac{p^2 r^2}{\hbar^2} - \varkappa^2}} = \pi\left(\nu + \frac{1}{2}\right) \quad \nu \in \mathbb{N}} \tag{4.60}$$

wobei

$$p^2c^2 = (E-V)^2 - m^2c^4 \tag{4.61}$$

Drückt man die Quantisierungsbedingung durch die Größen $E = \varepsilon mc^2$, $V = Wmc^2$ und $\lambda = \frac{\hbar}{mc}$ aus, so erhält man

$$\boxed{\begin{aligned} &\int_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{\lambda} \sqrt{(\varepsilon - W)^2 - 1 - \left(\frac{\lambda\varkappa}{r}\right)^2} \\ +\; &\frac{\varkappa\lambda}{2}\int_{r_1}^{r_2} dr \frac{1 + r\frac{\phi'}{\phi}}{r^2\sqrt{(\varepsilon-W)^2 - 1 - \left(\frac{\lambda\varkappa}{r}\right)^2}} = \pi\left(\nu + \frac{1}{2}\right) \quad \nu \in \mathbb{N} \end{aligned}} \tag{4.62}$$

4.1.5 WKB–G für Coulomb–Potential exakt

Zur Berechnung der WKB–Integrale der Quantisierungsbedingung von Good

$$\frac{1}{\lambda}\int_{r_1}^{r_2} dr \sqrt{\Omega} \quad - \frac{(\varkappa)\,\lambda}{2}\int_{r_1}^{r_2} dr \frac{W'}{r\phi\sqrt{\Omega}} = \pi\left(\nu + \frac{1}{2}\right) \tag{4.63}$$

mit

$$\Omega = (\varepsilon - W)^2 - 1 - \left(\frac{\varkappa}{r}\right)^2 \lambda^2 \tag{4.64}$$

$$\phi = \varepsilon + \frac{\bar{\alpha}\lambda}{r} + 1 \tag{4.65}$$

für Coulomb–Potential

$$W(r) = -\frac{Z\alpha\lambda}{r} \quad \Rightarrow \quad W'(r) = \frac{Z\alpha\lambda}{r^2} \tag{4.66}$$

$$1 - r\frac{W'}{\phi} = \phi^{-1}[\phi - rW'] = \frac{\varepsilon + 1}{\phi} \tag{4.67}$$

$$\frac{1}{\lambda}\int\limits_{r_1}^{r_2} dr\ \sqrt{\Omega} + \frac{\varkappa\lambda(\varepsilon+1)}{2}\int\limits_{r_1}^{r_2} dr\ \frac{1}{\phi r^2\sqrt{\Omega}} = \pi\left(\nu + \frac{1}{2}\right) \tag{4.68}$$

nutzt man die im **(Anhang C)** aufgeführten Formeln von Heinz Krüger aus. Exemplarisch soll hier die Integration des ersten Integrals explizit ausgeführt werden. Mit den Formeln aus dem Anhang kann das zweite Integral problemlos analog berechnet werden.

$$\frac{1}{\lambda}\int\limits_{r_1}^{r_2} dr\ \sqrt{\Omega} = \frac{1}{\lambda}\int\limits_{r_1}^{r_2} dr\ \frac{1}{r}\sqrt{\Omega r^2} \tag{4.69}$$

$$\Omega r^2 = (\varepsilon^2 - 1)r^2 + 2\varepsilon\bar{\alpha}\lambda r + \lambda^2(\bar{\alpha}^2 - \varkappa^2) \tag{4.70}$$

Nach **(Anhang C)** gilt für $r_1 < r_2$

$$\int\limits_{r_1}^{r_2} dr\ \frac{1}{r}\sqrt{ar^2 + br + c} = \pi\left[\frac{b}{2\sqrt{-a}} - \sqrt{-c}\right] \tag{4.71}$$

Die Konstanten sind hier

$$\begin{aligned} a &= \varepsilon^2 - 1 < 0 \\ b &= 2\varepsilon\bar{\alpha}\lambda & (4.72) \\ c &= \lambda^2(\bar{\alpha}^2 - \varkappa^2) < 0 & (4.73) \end{aligned}$$

Unter Verwendung von **(2.66)** erhält man

$$\Rightarrow \frac{1}{\lambda}\int\limits_{r_1}^{r_2} dr\ \sqrt{\Omega} = \pi\left[\frac{\varepsilon\bar{\alpha}}{\sqrt{1-\varepsilon^2}} - \sqrt{\varkappa^2 - \bar{\alpha}^2}\right] = \nu \tag{4.74}$$

Führt man die zweite Integration auch noch aus, so findet man als WKB–Quantisierungsbedingung die exakte Feinstrukturformel von Sommerfeld.

4.2 WKB–Good ohne Wurzelentwicklung

Wurzelziehen der Gleichung **(4.48)** liefert

$$\frac{S'}{S}\sqrt{S^2-\left(\varkappa-\frac{1}{2}\right)^2}=\pm\frac{1}{r}\sqrt{\frac{p^2r^2}{\hbar^2}-\varkappa(\varkappa-1)+\varkappa r\frac{\phi'}{\phi}} \tag{4.75}$$

Dieses Problem läßt sich abkürzend fassen durch

$$\iff \frac{dS}{dr}\sigma(S)=\varrho(r) \qquad \forall r\in(0,\infty) \tag{4.76}$$

$$\iff \int\limits_{S(r_0)}^{S(r)}\sigma(S)\;dS=\int\limits_{r_0}^{r}\varrho(r)\;dr \qquad \forall r_0,r\in(0,\infty) \tag{4.77}$$

Vergleiche hierzu Forster [6] (§11). An der Differentialgleichung kann der Wert der Funktion $S(r)$ an zwei Stellen abgelesen werden:

$$S(r_1)=\varkappa-\frac{1}{2} \qquad S(r_2)=-(\varkappa-\frac{1}{2}) \tag{4.78}$$

oder

$$S(r_2)=\varkappa-\frac{1}{2} \qquad S(r_1)=-(\varkappa-\frac{1}{2}) \tag{4.79}$$

wobei $r_1<r_2$ die kleinste bzw. größte Nullstelle der Funktion $\varrho(r)$ ist. Aus der ersten Möglichkeit erhält man die beiden Gleichungen

$$\int\limits_{\varkappa-\frac{1}{2}}^{S(r)}\sigma(S)\;dS \;=\; \pm\int\limits_{r_1}^{r}\varrho(r)\;dr \tag{4.80}$$

$$\int\limits_{-(\varkappa-\frac{1}{2})}^{S(r)}\sigma(S)\;dS \;=\; \pm\int\limits_{r_2}^{r}\varrho(r)\;dr \tag{4.81}$$

Es gilt[1]

$$\begin{aligned}\int\sigma(S)\;dS &= \int\frac{\sqrt{S^2-\left(\varkappa-\frac{1}{2}\right)^2}}{S}\;dS\\ &= \sqrt{S^2-\left(\varkappa-\frac{1}{2}\right)^2}-\left(\varkappa-\frac{1}{2}\right)\arccos\frac{\varkappa-\frac{1}{2}}{S}\end{aligned} \tag{4.82}$$

[1] vergleiche Bronstein Integral Nr. 217

Für $|S| \gg \varkappa - \frac{1}{2}$ gilt

$$\int\limits_{\varkappa-\frac{1}{2}}^{S} \sigma(S)\, dS = |S| - \left(\frac{\pi}{2} + m_1\pi\right)\left(\varkappa - \frac{1}{2}\right) \quad \forall m_1 \in \mathbb{Z} \tag{4.83}$$

$$\int\limits_{-\left(\varkappa-\frac{1}{2}\right)}^{S} \sigma(S)\, dS = |S| - \left(\frac{\pi}{2} + m_2\pi\right)\left(\varkappa - \frac{1}{2}\right) \quad \forall m_2 \in \mathbb{Z} \tag{4.84}$$

Durch Subtraktion der beiden Gleichungen erhält man

$$n\pi\left(\varkappa - \frac{1}{2}\right) = \pm\int\limits_{r_1}^{r_2} \varrho(r)\, dr \qquad \forall n \in \mathbb{Z} \tag{4.85}$$

Nutzt man noch aus, daß $\varkappa \in \mathbb{Z} - \{0\}$, so erhält man eine Quantisierungsbedingung

$$\frac{n\pi}{2} = \int\limits_{r_1}^{r_2} \varrho(r)\, dr \qquad \forall n \in \mathbb{Z} \tag{4.86}$$

4.3 Globale WKB–Dirac–Näherung

Ausgehend von der bereits von Good benutzten Formel

$$\partial_r^2\eta_0 - \frac{\phi'}{\phi}\partial_r\eta_0 + \left[\frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{\varkappa(\varkappa-1)}{r^2} + \frac{\phi'\varkappa}{\phi r}\right]\eta_0 = 0 \tag{4.87}$$

kann mit der Transformation

$$\eta_0 = \sqrt{\frac{\phi'}{\phi}}g \tag{4.88}$$

obige Gleichung auf Normalform gebracht werden (vergleiche **Anhang B**).

$$g'' + \left[\frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{\varkappa(\varkappa-1)}{r^2} + \frac{\phi'\varkappa}{\phi r} + \frac{2\phi''\phi - \phi'^2}{4\phi^2} - \frac{\phi'^2}{2\phi^2}\right]g = 0 \tag{4.89}$$

$$g'' + \left[\frac{1}{\lambda^2}\left\{(\varepsilon - W)^2 - 1\right\} - \frac{\varkappa(\varkappa-1)}{r^2} + \frac{\phi'\varkappa}{\phi r} + \frac{\phi''}{2\phi} - \frac{3\phi'^2}{4\phi^2}\right]g = 0 \tag{4.90}$$

Diese Gleichung ist von der Form

$$\left[\partial_r^2 + a(r)\right]g = 0 \tag{4.91}$$

mit entsprechend definiertem $a(r)$. Für eine Gleichung dieser Art, können mittels globaler WKB–Näherung Energieeigenwerte und Wellenfunktion semiklassisch genähert werden:

$$\boxed{\int_{r_1}^{r_2} dr\ \sqrt{a(r)} = \pi(v + \frac{1}{2}) \text{ mit } v \in \mathbb{N}} \tag{4.92}$$

WKB–Quantisierungsbedingung

r_1 und r_2 sind die beiden Nullstellen der Funktion $a(r)$. Die semiklassischen Radialfunktionen lauten

$$\boxed{\psi_v(r) = C_v \frac{\varphi_v(z(r))}{\sqrt{z'}}} \tag{4.93}$$

$\varphi_v(z)$ sind die Eigenfunktionen des Harmonischen Oszillators.

4.3.1 Langer–Transformation zur Uniformisierung

Man erkennt, daß für die Separationskonstante $\varkappa = 1$ ein Spezialfall eintritt. In der Funktion $a(r)$ verschwindet der Term

$$-\frac{\varkappa(\varkappa - 1)}{r^2} \tag{4.94}$$

Man stellt fest, daß eine **Langer–Transformation** dieses spezielle Verhalten aufhebt:

$$r = \exp(x) \iff x = \ln(r) \quad g(r) = \exp\left(\frac{x}{2}\right)\psi(x) \tag{4.95}$$

$$\partial_r = \exp(-x)\partial_x \tag{4.96}$$

$$\Rightarrow \partial_r^2 = (\exp(-x)\partial_x)(\exp(-x)\partial_x) = -\exp(-2x)\partial_x + \exp(-2x)\partial_x^2 \tag{4.97}$$

$$= \exp(-2x)\left(\partial_x^2 - \partial_x\right) \tag{4.98}$$

$$\partial_r^2 g(r) = \exp(-2x)\left(\partial_x^2 - \partial_x\right)\exp\left(\frac{x}{2}\right)\psi(x) \tag{4.99}$$

$$= \exp(-2x)\exp\left(\frac{x}{2}\right)\left[\frac{1}{4}\psi + \partial_x\psi + \partial_x^2\psi - \frac{1}{2}\psi - \partial_x\psi\right] \tag{4.100}$$

$$= \exp(-2x)\exp\left(\frac{x}{2}\right)\left[\partial_x^2 - \frac{1}{4}\right]\psi(x) \tag{4.101}$$

Als Langer–transformierte Differentialgleichung erhält man somit

$$\left\{\frac{\left[\partial_x^2 - \frac{1}{4}\right]}{e^{2x}} + \frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{\varkappa(\varkappa-1)}{e^{2x}} + \frac{\varkappa e^{-x}\partial_x\phi}{e^x\phi} - \frac{3(e^{-x}\partial_x\phi)^2}{4\phi^2} + \frac{e^{-2x}(\partial_x^2 - \partial_x)\phi}{2\phi}\right\}\psi(x) = 0 \tag{4.102}$$

mit

$$\frac{p^2}{\hbar^2} = \frac{1}{\lambda^2}\left[(\varepsilon - W)^2 - 1\right] \tag{4.103}$$

Einfache algebraische Umformungen führen sofort zur Gleichung

$$\boxed{\begin{array}{l} \Big\{\partial_x^2 + \frac{e^{2x}}{\lambda^2}\left[(\varepsilon - W)^2 - 1\right] - (\varkappa - \frac{1}{2})^2 + (\varkappa - \frac{1}{2})\frac{\partial_x \phi}{\phi} \\ + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial_x^2 \phi}{\phi} - \frac{3(\partial_x \phi)^2}{2\phi^2}\right)\Big\}\psi(x) = 0 \end{array}} \tag{4.104}$$

Auch diese Differentialgleichung hat bei entsprechend definiertem $a_0(x)$ die Form

$$\left\{\partial_x^2 + a_0(x)\right\}\psi(x) = 0 \tag{4.105}$$

Man erkennt, daß für alle $\varkappa$ die Gleichung die gleiche Gestalt hat. Außerdem kann an dieser Form gut der dominante Teil abgelesen werden. Die Comptonwellenlänge des Elektrons λ ist gegeben durch

$$\lambda = \frac{\hbar}{mc} = 3.8616 \cdot 10^{-11} cm \tag{4.106}$$

Die in $a(x)$ vorkommende Größe λ^{-2} hat den Zahlenwert

$$\lambda^{-2} = 6.7060 \cdot 10^{20} \frac{1}{cm^2} \tag{4.107}$$

Wendet man auf diese Differentialgleichung zweiter Ordnung in Normalform die in **(3.1)** vorgestellte WKB–Näherung an, so lautet auch hier die Quantisierungsbedingung

$$\int_{x_1}^{x_2} dx\, \sqrt{a_0(x)} = \pi\left(\nu + \frac{1}{2}\right) \qquad \nu \in \mathbb{N} \tag{4.108}$$

4.3.2 Approximationen hin zur Good–Form

Der erste Schritt der Näherung besteht in der Vernachlässigung des letzten Terms der Funktion $a_0(x)$, da dieser eine Schwarz–Ableitung ist. Numerische Untersuchungen haben diese Vernachlässigung gerechtfertigt. Die entsprechenden Ergebnisse können den Kapiteln über Numerik entnommen werden. Die erste Näherung der Funktion $a_0(x)$ lautet somit:

$$a_1(x) = \frac{e^{2x}}{\lambda^2}\left[(\varepsilon - W)^2 - 1\right] - (\varkappa - \frac{1}{2})^2 + (\varkappa - \frac{1}{2})\frac{\partial_x \phi}{\phi} \tag{4.109}$$

Im nächsten Schritt nutzt man aus, daß der Term

$$\left(\varkappa - \frac{1}{2}\right)\frac{\partial_x \phi}{\phi} \tag{4.110}$$

den Spin Bahn Beitrag liefert und im Vergleich zum Rest klein ist. Somit liegt die Idee nahe, die in der Quantisierungsbedingung auftretende Wurzel

$$\sqrt{a_1(x)} \tag{4.111}$$

gemäß

$$\sqrt{x+\delta} \approx \sqrt{x} + \frac{\delta}{2\sqrt{x}} \quad \text{für } \delta \ll x \tag{4.112}$$

zu entwickeln. Die resultierende WKB–Energieeigenwertbedingung hat dann eine ähnliche Form wie die von Good vorgestellte.

$$\begin{aligned} \sqrt{a_2(x)} &= \sqrt{\frac{e^{2x}}{\lambda^2}\left[(\varepsilon - W)^2 - 1\right] - (\varkappa - \frac{1}{2})^2} \\ &+ \frac{\left(\varkappa - \frac{1}{2}\right)\partial_x \phi}{2\phi\sqrt{\frac{e^{2x}}{\lambda^2}\left[(\varepsilon - W)^2 - 1\right] - (\varkappa - \frac{1}{2})^2}} \end{aligned} \tag{4.113}$$

4.3.3 Ein weiterer Zugang zur WKB–G

Ausgehend von **(4.90)** kann durch Untersuchung des asymptotischen Verhaltens am Ursprung ein dominanter und ein kleiner Teil getrennt werden.

$$\frac{1}{\lambda^2}\left[(\varepsilon - W)^2 - 1\right] - \frac{\varkappa^2}{r^2} - \frac{1}{4r^2} \tag{4.114}$$

dominanter Teil

$$\frac{\varkappa}{r^2} + \frac{1}{4r^2} + \frac{\phi'\varkappa}{\phi r} + \frac{\phi''}{2\phi} - \frac{3\,(\phi')^2}{4\phi^2} \tag{4.115}$$

Störung

Vernachlässigt man nun Terme mit der Form der Schwarz–Ableitung, so erhält man nach Entwicklung der WKB–Wurzel die WKB–Formel von Good. Die Approximation der Wurzel wird gemäß **(4.112)** durchgeführt, wobei der dominante Teil durch x und der Störungsterm durch δ repräsentiert wird.

4.4 Nichtrelativistischer Grenzfall

Ausgehend von **(4.104)** lautet die relativistische WKB–Quantisierungsbedingung (mit nichtrelativistischer Vergleichsfunktion):

$$\int_{x_1}^{x_2} dx\, \sqrt{a_0(x)} = \pi\left(\nu + \frac{1}{2}\right) \tag{4.116}$$

wobei $a_0(x)$ definiert ist durch

$$a(x) = \frac{e^{2x}}{\lambda^2}\left[(\varepsilon - W)^2 - 1\right] - (\varkappa - \frac{1}{2})^2 + (\varkappa - \frac{1}{2})\frac{\partial_x \phi}{\phi} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial_x^2 \phi}{\phi} - \frac{3(\partial_x \phi)^2}{2\phi^2}\right) \tag{4.117}$$

mit

$$\phi(x) = E - V + mc^2 \tag{4.118}$$

Um auf eine nichtrelativistische Formel zu kommen, muß die relativistische Energie E durch die nichtrelativistische Energie E_{nr} ausgedrückt werden

$$E = mc^2 + E_{nr} \tag{4.119}$$

Im Grenzübergang $c \to \infty$ divergiert ϕ, während die Ableitungen von ϕ lediglich das Potential beinhalten und sich somit nicht mit c verändern.

Man erhält deshalb die nichtrelativistische WKB–Quantisierungsbedingung

$$\int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{e^{2x}\left(\left(1 - \frac{E_{nr} + V}{mc^2}\right)^2 - 1 - \left(\frac{\varkappa - \frac{1}{2}}{e^x}\right)^2\right)} = \pi\left(\nu + \frac{1}{2}\right) \tag{4.120}$$

Transformation $r = e^x$

$$\int_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{\lambda}\sqrt{2\frac{E_{nr} - V}{mc^2} - \left(\frac{\varkappa - \frac{1}{2}}{r}\right)^2 \lambda^2} = \pi\left(\nu + \frac{1}{2}\right) \tag{4.121}$$

$$\int_{r_1}^{r_2} dr \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_{nr} - V) - \left(\frac{\varkappa - \frac{1}{2}}{r}\right)^2} = \pi\left(\nu + \frac{1}{2}\right) \tag{4.122}$$

Dies ist die Formel, die man als WKB–Quantisierungsbedingung erhält, wenn man von der nichtrelativistischen Schrödinger–Gleichung ausgeht.

Folglich ist obige relativistische Formel für ein Coulomb–Potential im nichtrelativistischen Grenzwert im Sinne von Schrödinger exakt.

Kapitel 5

Whittaker–Gleichung zum Vergleich

Die WKB–Quantisierungsbedingung von Good liefert für das Coulomb–Feld die exakten Energien. Dies ist allerdings nur mit Näherungen erreicht worden, welche bereits an einer skalaren Form der Radialgleichung durchgeführt wurden. Mein Bestreben, diese Näherungen zu umgehen oder zu verbessern, führte mich letztlich zur radialen Spinorgleichung, für welche die von Manfred Stein gefundene Spinortransformation mir half eine neue WKB–Formel herzuleiten, die ebenfalls die exakten Sommerfeld–Energien reproduziert, ohne jedoch weitere Näherungen zu benutzen. Numerische Untersuchungen zeigen außerdem ein weitaus stabileres Verhalten als beim Good–Verfahren.

5.1 Spinortransformation des Radialspinors

Die radiale Dirac–Gleichung

$$-\hbar\gamma_3\partial_r\eta i_2 + \left(\gamma_0\frac{E-V}{c} + \gamma_1\frac{\hbar\varkappa}{r}\right)\eta = mc\eta\gamma_0 \tag{5.1}$$

kann nach den folgenden leichten algebraischen Umformungen noch in der $\vec{\sigma}_1$ Ebene (in $\mathcal{G}(1,3)$ ist $\vec{\sigma}_1$ ein Bivektor) geeignet gedreht werden.

$$-\lambda\gamma_3\partial_r\eta i_2 + \left(\gamma_0(\varepsilon - W) + \gamma_1\lambda\frac{\varkappa}{r}\right)\eta = \eta\gamma_0 \tag{5.2}$$

Die Einführung einer reduzierten Variable $r = \lambda x$ liefert

$$-\gamma_3\partial_x\eta i_2 + \left(\gamma_0(\varepsilon - W) + \gamma_1\frac{\varkappa}{x}\right)\eta = \eta\gamma_0 \qquad \gamma_3|i_2 \tag{5.3}$$

$$-\partial_x\eta + \left(\gamma_3\gamma_0(\varepsilon - W) - i_2\frac{\varkappa}{x}\right)\eta i_2 = \gamma_3\eta\gamma_0 i_2 \tag{5.4}$$

$$-\partial_x\eta + \left(\vec{\sigma}_3(\varepsilon - W) - i_2\frac{\varkappa}{x}\right)\eta i_2 = \gamma_3\eta\gamma_0 i_2 \tag{5.5}$$

Mit $\vec{\sigma}_3 = -\vec{\sigma}_1 i_2$ folgt

$$\partial_x \eta + \left(\vec{\sigma}_1(\varepsilon - W) + \frac{\varkappa}{x}\right) i_2 \eta i_2 = -\gamma_3 \eta \gamma_0 i_2 \tag{5.6}$$

Wegen $\eta^* = \gamma_0 \eta \gamma_0 = -i_2 \eta i_2$ mit $\eta = \eta_0 + \vec{\sigma}_1 \eta_1$ folgt

$$\partial_x \eta - \left(\vec{\sigma}_1(\varepsilon - W) + \frac{\varkappa}{x}\right) \eta^* = -\vec{\sigma}_1 \eta \tag{5.7}$$

Führt man nun den gedrehten Spinor

$$\boxed{\eta = e^{-\vec{\sigma}_1 \beta/2} \chi \qquad \text{const.} = \beta \in \mathbb{R}} \tag{5.8}$$

ein, so erhält man

$$\partial_x e^{-\vec{\sigma}_1 \beta/2} \chi - \left(\vec{\sigma}_1(\varepsilon - W) + \frac{\varkappa}{x}\right) e^{\vec{\sigma}_1 \beta/2} \chi^* = -\vec{\sigma}_1 e^{-\vec{\sigma}_1 \beta/2} \chi \qquad e^{\vec{\sigma}_1 \beta/2} | \tag{5.9}$$

$$\partial_x \chi - \left(\vec{\sigma}_1(\varepsilon - W) + \frac{\varkappa}{x}\right) e^{\vec{\sigma}_1 \beta} \chi^* = -\vec{\sigma}_1 \chi \tag{5.10}$$

5.2 Entkopplung der Radialgleichung

Wegen $\chi = \chi_0 + \vec{\sigma}_1 \chi_1$ folgt mit $e^{\vec{\sigma}_1 \beta} = \cosh \beta + \vec{\sigma}_1 \sinh \beta$ eine Zerlegung der Spinorgleichung in zwei Komponenten.

$$\begin{aligned} \partial_x \chi_0 \quad - \quad & \left(\sinh(\beta)(\varepsilon - W) + \cosh(\beta)\frac{\varkappa}{x}\right) \chi_0 \\ + \quad & \left(\cosh(\beta)(\varepsilon - W) + \sinh(\beta)\frac{\varkappa}{x}\right) \chi_1 = -\chi_1 \end{aligned} \tag{5.11}$$

$$\begin{aligned} \partial_x \chi_1 \quad - \quad & \left(\cosh(\beta)(\varepsilon - W) + \sinh(\beta)\frac{\varkappa}{x}\right) \chi_0 \\ + \quad & \left(\sinh(\beta)(\varepsilon - W) + \cosh(\beta)\frac{\varkappa}{x}\right) \chi_1 = -\chi_0 \end{aligned} \tag{5.12}$$

Die willkürliche Konstante β sei nun festgelegt durch

$$\cosh \beta = \frac{1}{\varepsilon} \qquad \text{für } \varepsilon > 0 \tag{5.13}$$

$$\sinh \beta = \frac{1}{\varepsilon}\sqrt{1 - \varepsilon^2} \tag{5.14}$$

$$\partial_x \chi_0 = \left[\frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\varepsilon}(\varepsilon - W) + \frac{\varkappa}{\varepsilon x}\right] \chi_0 - \left[\frac{\varepsilon - W}{\varepsilon} + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\varepsilon}\frac{\varkappa}{x} + 1\right] \chi_1 \tag{5.15}$$

$$\partial_x \chi_1 = \left[\frac{\varepsilon - W}{\varepsilon} + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\varepsilon}\frac{\varkappa}{x} - 1\right] \chi_0 - \left[\frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\varepsilon}(\varepsilon - W) + \frac{\varkappa}{\varepsilon x}\right] \chi_1 \tag{5.16}$$

Mit

$$A = \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\varepsilon}(\varepsilon - W) + \frac{\varkappa}{\varepsilon x} \tag{5.17}$$

$$B = \frac{\varepsilon - W}{\varepsilon} + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\varepsilon}\frac{\varkappa}{x} \tag{5.18}$$

erhält man

$$\partial_x \chi_0 = A\chi_0 - (B+1)\chi_1 \tag{5.19}$$

$$\partial_x \chi_1 = (B-1)\chi_0 - A\chi_1 \tag{5.20}$$

Aus der zweiten Gleichung kann formal χ_0 berechnet werden

$$\chi_0 = \frac{1}{B-1}\left[\partial_x\chi_1 + A\chi_1\right] \tag{5.21}$$

Differenziert man nach x, so erhält man mit der ersten Gleichung eine Differentialgleichung für χ_1.

$$\partial_x\chi_0 = -\frac{\partial_x B}{(B-1)^2}\left[\partial_x\chi_1 + A\chi_1\right] + \frac{1}{B-1}\left[\partial_x^2\chi_1 + (\partial_x A)\chi_1 + A(\partial_x\chi_1)\right] \tag{5.22}$$

$$= \frac{A}{B-1}\left[\partial_x\chi_1 + A\chi_1\right] - (B-1)\chi_1 \tag{5.23}$$

$$\frac{1}{B-1}\partial_x^2\chi_1 - \frac{\partial_x B}{(B-1)^2}\partial_x\chi_1 + \left[-\frac{\partial_x B}{(B-1)^2}A + \frac{\partial_x A}{B-1} - \frac{A^2}{B-1} + B + 1\right]\chi_1 = 0 \tag{5.24}$$

$$\partial_x^2\chi_1 - \frac{\partial_x B}{B-1}\partial_x\chi_1 + \left[-\frac{\partial_x B}{B-1}A + \partial_x A - A^2 + B^2 - 1\right]\chi_1 = 0 \tag{5.25}$$

5.3 Transformation auf Normalform

Die Transformation auf Normalform kann mit dem Ansatz

$$\chi_1 = fg \tag{5.26}$$

erreicht werden (vergleiche **Anhang B**).

$$f = \exp\left\{\frac{1}{2}\int^x \frac{\partial_x B}{B-1}\,dx\right\} \tag{5.27}$$

$$\partial_x f = -\frac{1}{2}\frac{\partial_x B}{B-1}f \tag{5.28}$$

$$\begin{aligned}
\partial_x^2 f &= -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial_x^2 B}{B-1}-\left(\frac{\partial_x B}{B-1}\right)^2\right) f - \frac{1}{2}\frac{\partial_x B}{B-1}\partial_x f && (5.29)\\
&= -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial_x^2 B}{B-1}-\left(\frac{\partial_x B}{B-1}\right)^2\right) f + \left(\frac{1}{2}\frac{\partial_x B}{B-1}\right)^2 f && (5.30)\\
&= -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial_x^2 B}{B-1}-\frac{3}{2}\left(\frac{\partial_x B}{B-1}\right)^2\right) f && (5.31)
\end{aligned}$$

$$\frac{f''}{f} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial_x^2 B}{B-1}-\frac{3}{2}\left(\frac{\partial_x B}{B-1}\right)^2\right) \tag{5.32}$$

$$-\frac{\partial_x B}{B-1}\frac{f'}{f} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial_x B}{B-1}\right)^2 \tag{5.33}$$

Somit erhält man die Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$\begin{aligned}
\ddot{g} &+ \left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial_x^2 B}{B-1}-\frac{3}{2}\left(\frac{\partial_x B}{B-1}\right)^2\right)+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial_x B}{B-1}\right)^2\right.\\
&- \left.\frac{\partial_x B}{B-1}A+\partial_x A - A^2 + B^2 - 1\right] g = 0 && (5.34)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\ddot{g} &+ \left[-\frac{1}{2}\frac{\partial_x^2 B}{B-1}+\frac{5}{4}\left(\frac{\partial_x B}{B-1}\right)^2-\frac{\partial_x B}{B-1}A\right.\\
&+ \left.\partial_x A + (\varepsilon - W)^2 - \frac{\varkappa^2}{x^2} - 1\right] g = 0 && (5.35)
\end{aligned}$$

Mit

$$\boxed{\begin{aligned} a_W(x) = &-\frac{1}{2}\frac{\partial_x^2 B}{B-1}+\frac{5}{4}\left(\frac{\partial_x B}{B-1}\right)^2\\ &-\frac{\partial_x B}{B-1}A+\partial_x A+(\varepsilon-W)^2-\frac{\varkappa^2}{x^2}-1\end{aligned}} \tag{5.36}$$

liegt eine Differentialgleichung der Form

$$\left(\partial_x^2 + a_W\right) g = 0 \tag{5.37}$$

vor.

5.4 Whittaker–Gleichung zum Vergleich

Als geeignete Referenzgleichung bietet sich die Whittaker–Gleichung an. Dies erkennt man leicht, wenn man das Coulomb–Potential einsetzt.

$$A = \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\varepsilon}\left(\varepsilon + \frac{Z\alpha}{x}\right) + \frac{\varkappa}{\varepsilon x} = \sqrt{1-\varepsilon^2} + \sqrt{1-\varepsilon^2}\frac{Z\alpha}{\varepsilon x} + \frac{\varkappa}{\varepsilon x} \tag{5.38}$$

$$B = 1 + \frac{Z\alpha}{\varepsilon x} + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}{\varepsilon x} \tag{5.39}$$

$$\partial_x A = -\sqrt{1-\varepsilon^2}\frac{Z\alpha}{\varepsilon x^2} - \frac{\varkappa}{\varepsilon x^2} \tag{5.40}$$

$$\partial_x B = -\frac{Z\alpha}{\varepsilon x^2} - \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}{\varepsilon x^2} \tag{5.41}$$

$$\partial_x^2 B = \frac{2Z\alpha}{\varepsilon x^3} + \frac{2\sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}{\varepsilon x^3} \tag{5.42}$$

$$\frac{\partial_x B}{B-1} = -\frac{1}{\varepsilon x^2}(Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa)\varepsilon x(Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa)^{-1} = -\frac{1}{x} \tag{5.43}$$

$$\frac{\partial_x^2 B}{B-1} = \frac{2}{\varepsilon x^3}(Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa)\varepsilon x(Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa)^{-1} = \frac{2}{x^2} \tag{5.44}$$

$$\begin{aligned}\partial_x^2 g &+ \left[\frac{5}{4x^2} - \frac{1}{x^2} + \frac{1}{x}\left(\sqrt{1-\varepsilon^2} + \sqrt{1-\varepsilon^2}\frac{Z\alpha}{\varepsilon x} + \frac{\varkappa}{\varepsilon x}\right)\right.\\ &- \sqrt{1-\varepsilon^2}\frac{Z\alpha}{\varepsilon x^2} - \frac{\varkappa}{\varepsilon x^2} - (1-\varepsilon^2) - 2(1-\varepsilon^2)\frac{Z\alpha}{\varepsilon x}\\ &- \frac{2\sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}{\varepsilon x} - \frac{(1-\varepsilon^2)\bar{\alpha}^2}{\varepsilon^2 x^2} - \frac{2\sqrt{1-\varepsilon^2}Z\alpha\varkappa}{\varepsilon^2 x^2}\\ &- \frac{\varkappa^2}{\varepsilon^2 x^2} + 1 + 2Z\alpha\varepsilon x + \frac{2\sqrt{1-\varepsilon^2}\varkappa}{\varepsilon x} + \frac{\bar{\alpha}^2}{\varepsilon^2 x^2}\\ &+ \left.\frac{2\sqrt{1-\varepsilon^2}\bar{\alpha}\varkappa}{\varepsilon^2 x^2} + \frac{(1-\varepsilon^2)\varkappa^2}{\varepsilon^2 x^2}\right] g = 0\end{aligned} \tag{5.45}$$

$$\partial_x^2 g + \left[-(1-\varepsilon^2) + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2} + 2\varepsilon Z\alpha}{x} + \frac{\frac{1}{4} - (\varkappa^2 - \bar{\alpha}^2)}{x^2}\right] g = 0 \tag{5.46}$$

Mit der Koordinatentransformation $y = \xi x$ erhält man mit $\xi = 2\sqrt{1-\varepsilon^2}$ die Whittaker–Gleichung

$$\boxed{\partial_y^2 g + \left[-\frac{1}{4} + \frac{2\varepsilon\bar{\alpha} + \sqrt{1-\varepsilon^2}}{2y\sqrt{1-\varepsilon^2}} + \frac{\frac{1}{4} - (\varkappa^2 - \bar{\alpha}^2)}{y^2}\right] g = 0} \tag{5.47}$$

Normierbare Lösungen gibt es nur unter folgenden Bedingungen

$$k \equiv \frac{2\varepsilon\bar{\alpha} + \sqrt{1-\varepsilon^2}}{2\sqrt{1-\varepsilon^2}} \tag{5.48}$$

$$m^2 \equiv \varkappa^2 - \bar{\alpha}^2 \iff m = \sqrt{\varkappa^2 - \bar{\alpha}^2} \tag{5.49}$$

$$m + \frac{1}{2} - k = -\nu \qquad \nu \in \mathbb{N}_0 \tag{5.50}$$

Normierungsbedingung

$$\sqrt{\varkappa^2 - \bar{\alpha}^2} - \frac{\varepsilon\bar{\alpha}}{\sqrt{1-\varepsilon^2}} = -\nu \tag{5.51}$$

$$\nu + \sqrt{\varkappa^2 - \bar{\alpha}^2} = \frac{\varepsilon\bar{\alpha}}{\sqrt{1-\varepsilon^2}} \tag{5.52}$$

$$\frac{\varepsilon}{\sqrt{1-\varepsilon^2}} = \frac{1}{\bar{\alpha}}\left(\nu + \sqrt{\varkappa^2 - \bar{\alpha}^2}\right) \tag{5.53}$$

Nach Quadrieren und Umkehren erhält man die Sommerfeldsche Feinstrukturformel

$$\frac{1}{\varepsilon^2} = \left(\frac{\bar{\alpha}}{\nu + \sqrt{\varkappa^2 - \bar{\alpha}^2}}\right)^2 + 1 \tag{5.54}$$

$$\boxed{\varepsilon = \left[1 + \left(\frac{\bar{\alpha}}{\nu + \sqrt{\varkappa^2 - \bar{\alpha}^2}}\right)^2\right]^{-1/2}} \tag{5.55}$$

Feinstrukturformel von Sommerfeld

Mit den Formeln aus **Anhang C** erhält man folgende Formel

$$\int_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{r}\,\sqrt{ar^2 + br + c} = \pi\left[\frac{b}{2\sqrt{-a}} - \sqrt{-c}\right] \tag{5.56}$$

Das WKB–Integral der Whittaker–Differentialgleichung ergibt

$$
\begin{aligned}
\int_{y_1}^{y_2} dy \quad & \sqrt{-\frac{1}{4}+\frac{2\varepsilon\bar{\alpha}+\sqrt{1-\varepsilon^2}}{2y\sqrt{1-\varepsilon^2}}+\frac{\bar{\alpha}^2-\varkappa^2+\frac{1}{4}}{y^2}} = \\
= & \int_{y_1}^{y_2} dy \frac{1}{y}\sqrt{-\frac{1}{4}y^2+\frac{2\varepsilon\bar{\alpha}+\sqrt{1-\varepsilon^2}}{2\sqrt{1-\varepsilon^2}}y+\frac{1}{4}-\varkappa^2+\bar{\alpha}^2} \\
= & \ \pi\left[\frac{2\varepsilon\bar{\alpha}+\sqrt{1-\varepsilon^2}}{2\sqrt{1-\varepsilon^2}}-\sqrt{\varkappa^2-\bar{\alpha}^2-\frac{1}{4}}\right] \\
= & \ \pi\left[\frac{\varepsilon\bar{\alpha}}{\sqrt{1-\varepsilon^2}}+\frac{1}{2}-\sqrt{\varkappa^2-\bar{\alpha}^2-\frac{1}{4}}\right] \\
= & \ \pi\left[\nu+\frac{1}{2}+\sqrt{\varkappa^2-\bar{\alpha}^2}-\sqrt{\varkappa^2-\bar{\alpha}^2-\frac{1}{4}}\right]
\end{aligned}
\tag{5.57}
$$

Die neue WKB–Quantisierungsbedingung, die für das Coulomb–Potential per Konstruktion exakte Ergebnisse liefern muß, lautet

$$
\int_{x_1}^{x_2} dx\sqrt{a_W(x,\varkappa)} = \pi\left[\nu+\frac{1}{2}+\sqrt{\varkappa^2-\bar{\alpha}^2}-\sqrt{\varkappa^2-\bar{\alpha}^2-\frac{1}{4}}\right] \tag{5.58}
$$

wobei

$$
\boxed{
\begin{aligned}
a(x)=&-\frac{1}{2}\frac{\partial_x^2 B}{B-1}+\frac{5}{4}\left(\frac{\partial_x B}{B-1}\right)^2-\frac{\partial_x B}{B-1}A+\partial_x A \\
&+(\varepsilon-W)^2-\frac{\varkappa^2}{x^2}-1
\end{aligned}
}
\tag{5.59}
$$

$$
A = \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\varepsilon}(\varepsilon-W)+\frac{\varkappa}{\varepsilon x} \tag{5.60}
$$

$$
B = \frac{\varepsilon-W}{\varepsilon}+\frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\varepsilon}\frac{\varkappa}{x} \tag{5.61}
$$

5.5 Diskussion des Whittaker–WKB–Verfahrens

Die Versuche des vorigen Kapitels, die jeweils untersuchten Funktionen $a(x)$ auf eine Form zu bringen, die, bei Verwendung der Whittaker–Gleichung als Vergleichsdifferentialgleichung keine Näherungen bei der Liouville–Transformation nach sich ziehen, sind an der ungünstigen Entkopplung der Radialgleichung gescheitert. Mit der hier durchgeführten Spinortransformation des Radialspinors ist es mir gelungen, eine uniforme – positive und negative $\varkappa$ sind gleichberechtigt – skalare Radialgleichung der Dirac–Theorie herzuleiten, welche sich für den Spezialfall des Coulomb–Potentials auf die Whittakersche Differentialgleichung reduziert. Folglich liefert ein Liouville–Vergleich mit der Whittaker–Gleichung exakte Ergebnisse. Entscheidend für die praktische Handhabung ist die explizite Berechenbarkeit des Integrals **(5.57)**. Erst hiermit konnte der zum $\pi\left(\nu+\frac{1}{2}\right)$ Term des harmonischen Oszillators analoge Ausdruck gefunden werden.

In der nichtrelativistischen Theorie war der nichtrelativistische harmonische Oszillator als Vergleichsproblem sehr günstig. Daß in einer relativistischen Theorie der Vergleich mit einem relativistischen quantenmechanischen Problem, dessen Lösung exakt bekannt ist, bessere Ergebnisse liefert als ein nichtrelativistischer Vergleich, sollte deshalb nicht verwundern.

Kapitel 6

Numerische Algorithmen

In diesem Kapitel werden Algorithmen und analytische Hilfsrechnungen aufgeführt, die im Rahmen meiner Diplomarbeit Anwendung fanden. Numerische Rechnungen haben den Vorteil konkrete Zahlenwerte zu liefern. Falls man an Energieniveaus interessiert ist, sind numerische Ergebnisse sehr sinnvoll, da analytische Rechnungen meist nur näherungsweise durchgeführt werden können. Will man allerdings Zwischenergebnisse numerisch berechnen, so ist es sehr schwierig, damit analytisch weiterzuarbeiten. Im Fall der WKB–Näherung für gebundene Systeme, können numerisch sehr gut die Energiewerte für verschiedene WKB–Verfahren verglichen werden.

Die numerischen Rechnungen habe ich auf einem PC mit Intel 80386 Prozessor mit 25MHz durchgeführt. Als Programmiersprache habe ich Turbo Pascal 5.5 benutzt.

6.1 Nullstellensuche

6.1.1 Muellersche iterative Methode

Mathematischer Hintergrund

Bei dem iterativen Verfahren nach Mueller, handelt es sich um eine Kombination zweier verschiedener Verfahren. Das erste verwendet die inverse quadratische Interpolation zur Bestimmung einer Näherung der Nullstelle zu gegebener Funktion $f(x)$. Das zweite ist ein einfaches Intervallhalbierungsverfahren, welches immer dann angewandt wird, wenn das Interpolationsverfahren eine genäherte Nullstelle ausserhalb des nach Nullstellen zu durchsuchenden Intervalls $I = [x_l, x_r]$ liefern würde. Das Verfahren setzt voraus, daß die Funktionswerte an den Intervallenden unterschiedliches Vorzeichen haben. D.h.

$$f(x_l) \cdot f(x_r) \leq 0 \tag{6.1}$$

Das Intervallhalbierungsverfahren

Zuerst wird die Intervallmitte ermittelt:

$$x_m := \frac{1}{2}(x_l + x_r) \tag{6.2}$$

Für den Fall $f(x_m) \cdot f(x_r) < 0$ werden x_l und x_r ausgetauscht um zu garantieren, daß stets $f(x_m) \cdot f(x_r) > 0$ gilt.

Aus den folgenden Bedingungen ergeben sich damit die neuen Intervallgrenzen

$$x_l := \begin{cases} x_l & \text{falls } f(x_l) \cdot f(x_m) \leq 0 \\ x_m & \text{sonst} \end{cases} \tag{6.3}$$

$$x_r := \begin{cases} x_r & \text{falls } f(x_m) \cdot f(x_r) \leq 0 \\ x_m & \text{sonst} \end{cases} \tag{6.4}$$

Die inverse quadratische Interpolation

Man spricht auch von hyperbolischer Interpolation. Dabei wird die Umkehrfunktion $f^{-1}(x)$ durch ein quadratisches Polynom interpoliert. Der Interpoland wird wie folgt aus den Koordinaten von Punkten der Intervallgrenzen und der Intervallmitte berechnet:

$$y = f(x) \iff f^{-1}(y) = x \tag{6.5}$$

$$f^{-1}(y) \approx Q_2(y) = A(y - y_l)^2 + B(y - y_l) + C \tag{6.6}$$

mit

$$y_l = f(x_l) \quad , \quad y_m = f(x_m) \quad , \quad y_r = f(x_r) \tag{6.7}$$

An das Polynom sind drei Bedingungen gestellt:

$$\begin{array}{ll} 1) & Q_2(y_l) = x_l \ \Rightarrow C = x_l \\ 2) & Q_2(y_m) = x_m \\ 3) & Q_2(y_r) = x_r \end{array} \tag{6.8}$$

Die beiden noch zu bestimmenden Parameter A und B ergeben sich nach einigen einfachen Umformungen zu:

$$A = \frac{(x_r - x_l)(y_m - y_l) - (x_m - x_l)(y_r - y_l)}{(y_m - y_l)(y_r - y_l)(y_r - y_m)} \tag{6.9}$$

$$B = \frac{(x_m - x_l)(y_r - y_l)^2 - (x_r - x_l)(y_m - y_l)^2}{(y_m - y_l)(y_r - y_m)(y_r - y_l)} \tag{6.10}$$

Die erste Approximation der Nullstelle lautet:

$$x_0 = x_l + y_l(Ay_l - B) \tag{6.11}$$

Nachdem A und B explizit eingesetzt sind, erhält man

$$\begin{aligned} x_0 &= x_l + \frac{y_l}{y_m - y_l} \frac{1}{(y_r - y_l)(y_r - y_m)} \{(x_r - x_l)(y_m - y_l)y_l \\ &- (x_m - x_l)(y_r - y_l)y_l - (x_r - x_l)(y_m - y_l)(y_r - y_m) \\ &+ (x_r - x_l)(y_m - y_l)(y_r - y_l) - x_m - x_l)(y_r - y_l)^2\} \end{aligned} \tag{6.12}$$

Unter Ausnutzung der speziellen Eigenschaft des Mittelpunktes

$$x_r = 2x_m - x_l \tag{6.13}$$

schreibt sich der Ausdruck in der geschweiften Klammer als

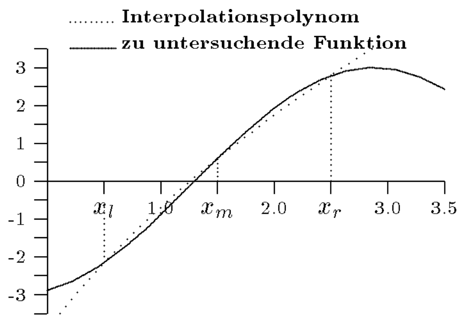
$$\begin{aligned} \{\quad\} &= 2(x_m - x_l)(y_m - y_l)y_l - (x_m - x_l)(y_r - y_l)y_l \\ &- 2(x_m - x_l)(y_m - y_l)(y_r - y_m) + 2(x_m - x_l)(y_m - y_l)(y_r - y_l) \\ &- (x_m - x_l)(y_r - y_l)^2 \\ &= (x_m - x_l)\Big[2(y_m - y_l)y_l - (y_r - y_l)y_l - 2(y_m - y_l)(y_r - y_m) \\ &+ 2(y_m - y_l)(y_r - y_l) - (y_r - y_l)(y_r - y_l)\Big] \\ &= (x_m - x_l)\left[2y_m(y_m - y_l) - y_r(y_r - y_l)\right] \end{aligned} \tag{6.14}$$

$$x_0 = x_l + \frac{y_l(x_m - x_l)}{y_m - y_l} \left\{ \frac{2y_m^2 - 2y_m y_l - y_r^2 + y_r y_l}{(y_r - y_l)(y_r - y_m)} \right\} \tag{6.15}$$

$$2y_m^2 - 2y_m y_l - y_r^2 + y_r y_l = -(y_r - y_l)(y_r - y_m) - y_m(y_r - 2y_m + y_l) \tag{6.16}$$

$$x_0 = x_l - \frac{y_l(x_m - x_l)}{y_m - y_l} \left\{ 1 + y_m \frac{y_r - 2y_m + y_l}{(y_r - y_l)(y_r - y_m)} \right\} \tag{6.17}$$

Näherungswert der Nullstelle



Näherung der Nullstelle mittels Interpolationspolynom

Das Verfahren 2 soll nur dann angewandt werden, wenn der Näherungswert im Intervall $[x_l, x_m]$ liegt. Sonst wird das Verfahren 1 zur Berechnung des nächsten Näherungswertes benutzt. Das Bisektionsverfahren garantiert per Konstruktion, daß der Näherungswert für die Nullstelle im gewünschten Intervall liegt.

Um nicht das inverse parabolische Interpolationsverfahren komplett durchrechnen zu müssen, um entscheiden zu können, ob der Näherungswert für die Nullstelle im gewünschten Intervall liegt, kann eine Ungleichung berechnet werden, die obigem Test äquivalent ist.

Man fordert von der Näherungsnullstelle:

$$x_l \le x \le x_m \tag{6.18}$$

$$\Longleftrightarrow \quad 0 \le x - x_l \le x_m - x_l \tag{6.19}$$

Nun werden die beiden Ungleichungen, die gleichzeitig erfüllt sein müssen, getrennt umgeformt. Dabei sei noch einmal daran erinnert, daß für die Funktionswerte die folgenden Beziehungen gültig sind:

$$\begin{array}{ll} 1) & y_m \, y_r > 0 \\ 2) & y_l \, y_r < 0 \\ 3) & y_l \, y_m < 0 \end{array} \tag{6.20}$$

1. $\underline{0 \le x - x_l}$

$$\frac{y_l(x_m - x_l)}{y_m - y_l} \left\{ 1 + y_m \frac{y_r - 2y_m + y_l}{(y_r - y_l)(y_r - y_m)} \right\} \le 0 \tag{6.21}$$

Wegen

$$\frac{y_l}{y_m - y_l} < 0 \tag{6.22}$$

muß nur

$$(x_m - x_l) \left\{ 1 + y_m \frac{y_r - 2y_m + y_l}{(y_r - y_l)(y_r - y_m)} \right\} \ge 0 \tag{6.23}$$

getestet werden.

$$\Longleftrightarrow \quad (x_m - x_l) \left\{ \frac{(y_r - y_l)(y_r - y_m) + y_m y_r - 2y_m^2 + y_l y_m}{(y_r - y_l)(y_r - y_m)} \right\} \ge 0 \tag{6.24}$$

$$\Longleftrightarrow \quad (x_m - x_l) \left\{ \frac{y_r^2 - y_l y_r + y_l y_m - 2y_m^2 + y_l y_m}{(y_r - y_l)(y_r - y_m)} \right\} \ge 0 \tag{6.25}$$

$$\iff (x_m - x_l)\left\{\frac{2y_m(y_m - y_l) - y_r(y_r - y_l)}{(y_r - y_l)(y_r - y_m)}\right\} \leq 0 \tag{6.26}$$

2. $x - x_l \leq x_m - x_l$

$$\iff -\frac{y_l(x_m - x_l)}{y_m - y_l}\left\{1 + y_m \frac{y_r - 2y_m + y_l}{(y_r - y_l)(y_r - y_m)}\right\} - (x_m - x_l) \leq 0 \tag{6.27}$$

$$\iff \frac{y_m(x_x - x_l)}{y_m - y_l}\left\{\frac{y_r(y_r - y_l) - 2y_m(y_m - y_l)}{(y_r - y_l)(y_r - y_m)}\right\} \geq 0 \tag{6.28}$$

Wegen

$$\frac{y_m}{y_m - y_l} > 0 \tag{6.29}$$

kann auch

$$(x_m - x_l)\left\{\frac{y_r(y_r - y_l) - 2y_m(y_m - y_l)}{(y_r - y_l)(y_r - y_m)}\right\} \geq 0 \tag{6.30}$$

untersucht werden.

$$\iff (x_m - x_l)\left\{\frac{2y_m(y_m - y_l) - y_r(y_r - y_l)}{(y_r - y_l)(y_r - y_m)}\right\} \leq 0 \tag{6.31}$$

Diese Ungleichung ist also für beide Fälle zu untersuchen. Mit den beiden gestellten Forderungen an x ist auch $x_l < x_m$ gefordert (Œ denn im umgekehrten Fall dreht sich nur in der letzten Ungleichung das Ungleichheitszeichen um). Mit dieser Kenntnis ist schließlich

$$\iff \frac{2y_m(y_m - y_l) - y_r(y_r - y_l)}{(y_r - y_l)(y_r - y_m)} \leq 0 \tag{6.32}$$

Für diese Ungleichung läßt sich wie folgt eine einfachere Ungleichung herleiten, welche die obige impliziert. Die Behauptung ist:

$$2y_m(y_m - y_l) - y_r(y_r - y_l) \leq 0 \quad \Rightarrow \quad (y_r - y_l)(y_r - y_m) \geq 0 \tag{6.33}$$

Der Beweis vollzieht sich wie folgt:

$$F(y_m) := 2y_m(y_m - y_l) - y_r(y_r - y_l) \tag{6.34}$$

$$F(y_m) = 2y_m^2 - 2y_m y_l - y_r(y_r - y_l) \tag{6.35}$$

Die Nullstellen dieser Funktion sind

$$y_{m\pm} = y_l \pm \sqrt{y_l^2 + \frac{y_r}{2}(y_r - y_l)} \tag{6.36}$$

Die Lösungen der Gleichung $F(y_m(\alpha)) \leq 0$ lauten

$$y_m(\alpha) = y_l \pm \alpha\sqrt{y_l^2 + \frac{y_r}{2}(y_r - y_l)} \quad \text{mit } \alpha \in [0,1] \tag{6.37}$$

Diese Lösungen werden eingesetzt in $(y_r - y_l)(y_r - y_m)$ so daß

$$\begin{aligned}(y_r - y_l)(y_r - y_m) &= (y_r - y_l)\left(y_r - y_l \pm \alpha\sqrt{y_l^2 + \frac{y_r}{2}(y_r - y_l)}\right) \\ &= (y_r - y_l)^2 \pm \alpha(y_r - y_l)\sqrt{y_l^2 + \frac{y_r}{2}(y_r - y_l)} \end{aligned} \tag{6.38}$$

Es bleibt also die Exaktheit der Ungleichung

$$y_l^2 + \frac{y_r}{2}(y_r - y_l) \leq (y_l - y_r)^2 \tag{6.39}$$

zu untersuchen.

$$\Longleftrightarrow \; y_l^2 + \frac{y_r^2}{2} - \frac{y_l y_r}{2} \leq y_l^2 - 2y_l y_r + y_r^2 \tag{6.40}$$

$$\Longleftrightarrow \; -y_r^2 - y_r y_l + 4y_l y_r \leq 0 \tag{6.41}$$

$$\Longleftrightarrow \; 3y_l y_r - y_r^2 \leq 0 \tag{6.42}$$

$$\Longleftrightarrow \; (3y_l - y_r)y_r \leq 0 \tag{6.43}$$

Diese Ungleichung ist erfüllt und damit die Behauptung bewiesen.

Somit ist nur die Ungleichung

$$2y_m(y_m - y_l) - y_r(y_r - y_l) \leq 0 \tag{6.44}$$

zu testen, um zu erkennen ob das inverse parabolische Interpolationsverfahren oder das Verfahren der Bisektion verwenden werden muß.

Algorithmus und Programm

1. Überprüfen, ob linker und rechter Funktionswert gleiches Vorzeichen haben

2. Ungleichung **(6.44)** auf Wahrheit prüfen

3a. Falls die Ungleichung wahr, wird das Verfahren der hyperbolischen Interpolation verwendet, um eine neue Approximation der Nullstelle zu finden.

4a. Interpolation der Umkehrfunktion der zu untersuchenden Funktion

5a. Der Funktionswert des Interpolationspolynoms an der Stelle 0 ist neue Approximation der Nullstelle

3b. Falls Ungleichung falsch, wird das Bisektionsverfahren benutzt

6 fahre fort mit 2.

```
            Ausgabefile : E:\rtmi.pas
procedure rtmi(var X,F         : extended;  { Start- und Ausgabewert    }
               fkt             : funkt;     { zu untersuchende Funktion }
{*******************************************************************}
{*                   Notwendige Type Deklaration                   *}
{*         type func = function(x:extended):extended;              *}
{*******************************************************************}
               var IER         : byte;      { Error Variable            }
               XLI,XRI,EPS     : extended;  { linke und rechte Grenze   }
                                            { und Genauigkeit           }
               IEND            : longint);  { Abbruchbedingung          }
{*******************************************************************}
{* Prozedur zur Bestimmung einer Nullstelle der Funktion fkt im    *}
{* Intervall [XLI,XRI] nach der iterativen Methode von MUELLER.    *}
{* Die Intervallgrenzen muessen garantieren, dass die Funktionswerte *}
{* auf den Grenzen unterschiedliches Vorzeichen haben.             *}
{*******************************************************************}
Var xl,xr,tol,fl,fr : extended; { linke und rechte x und Funktionswerte }
    xm,fm           : extended; { mittlerer x und Funktionswert        }
    dx              : extended; { Hilfsvariable bei hyp. Interp.       }
    i               : longint;  { Zaehler der Iterationen              }
    fertig          : boolean;  { Abbruchbedingung erreicht ?          }
procedure tausch;
{*******************************************************************}
{* Tauscht linke und rechte x und Funktionswerte aus um wieder die *}
{* gewuenschte Ausgangssituations herzustellen                     *}
{*******************************************************************}
```

```
            Ausgabefile : E:\rtmi.pas

begin
    tol := xr;
    xr := xl;
    xl := tol;
    tol := fr;
    fr := fl;
    fl := tol;
end;

Begin
{*********************************************************************}
{*               Initialisierung der Variablen                       *}
{*********************************************************************}
  ier := 0;
  fertig := false;
  i := 0;
  xl := xli; xr := xri;
  xm := 0.5*(xl+xr);
{*********************************************************************}
{*               Ueberpruefung der Startbedingungen                  *}
{*********************************************************************}
  fl := fkt(xl);
  if fl =0 then begin f := 0;x := xl; exit; end;
  fr := fkt(xr);
  if fr = 0 then begin f := 0; x := xr; exit; end;
  if fr*fl > 0 then begin ier := 2; exit; end;
  f := fkt(xm);
  if fr*f < 0 then tausch;
{*********************************************************************}
{*  Hierdurch wird eine Vorzeicheneinstellung garantiert             *}
{*  rechter und mittlerer Funktionswert haben gleiches Vorzeichen    *}
{*********************************************************************}
  repeat
    i := i+1;
    tol := f*(f-fl);
{*********************************************************************}
{*  Falls neuer x-Wert mittels hyperbolischer Interpolation nicht    *}
{*  auserhalb des angegebenen Intervalls liegen wird, kann die       *}
{*  hyperbolische Interpolation benutzt werden. Anderenfalls         *}
{*  garantiert das Intervallhalbierungsverfahren einen entsprechenden *}
{*  neuen x-Wert.                                                    *}
{*********************************************************************}
    if tol+tol - fr*(fr-fl) <= 0 then
    Begin
{*********************************************************************}
{*   Methode der hyperbolischen Interpolation                        *}
{*********************************************************************}
      dx := fl*(xm-xl)/(f-fl)*(1+f*(fr-2*f+fl)/(fr-fl)/(fr-f));
      x := xl-dx;
      fr := f;
      xr := xm;
      f := fkt(x);
      if f = 0 then exit;
      xm := x;
      if fr*f < 0 then tausch;
      if (abs(dx) <= eps) and (abs(f) <= 100*eps) then fertig := true;
    end
    else
    begin
```

```
              Ausgabefile : E:\rtmi.pas
{**********************************************************************}
{*                              Bisection                             *}
{**********************************************************************}
      xr := xm;
      fr := f;
      xm := 0.5*(xm+xl);
      f := fkt(xm);
      if f = 0 then begin x := xm; exit; end;
      if f*fr < 0 then tausch;
    end;
    if i >= iend then begin x:= xm; ier := 1; exit; end;
  until fertig;
{**********************************************************************}
{* Der mittleren x-Wertes wird der Ausgabevariable zugewiesen         *}
{**********************************************************************}
  x := xm;
end;
```

6.1.2 Modifiziertes Newton–Verfahren

Das gewöhnliche Newton–Verfahren hat den Vorteil, daß es sehr schnell auf die Nullstelle konvergiert. Schwerwiegende Nachteile des Iterationsverfahrens sind die Notwendigkeit der Ableitung der zu untersuchenden Funktion, sowie die Unsicherheit der Konvergenz – die Iteration muß nicht zwingend auf die Nullstelle zulaufen.

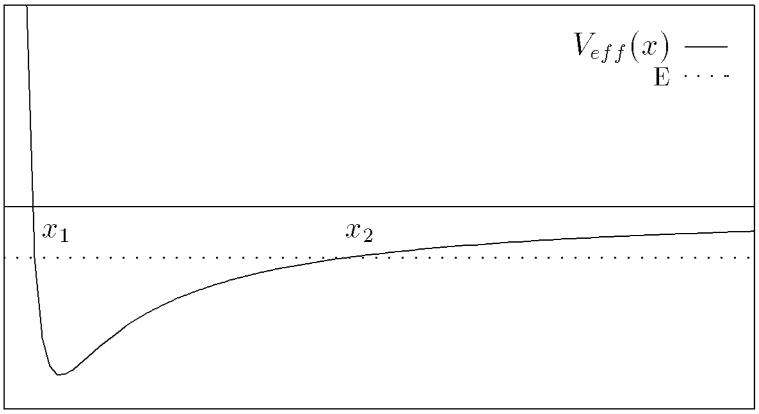
Die Ableitung der zu untersuchenden Funktion kann leicht über den Differenzenquotient berechnet werden, wobei man sich beim Festlegen von Δx davon überzeugen muß, daß das zugehörige Δy sicher oberhalb der Rechnergenauigkeit liegt. Da eine ungenaue Ableitung lediglich ein schlechteres Konvergenzverhalten der Iteration nach sich zieht, ist es sinnvoll Δx eher aus einem Bereich zu wählen der mit Sicherheit die Rechnergenauigkeit respektiert. In meinen Programmen, die das Newton–Verfahren nutzen, habe ich Δx meist 10^{-8} gewählt bei einer Rechengenauigkeit von 10^{-18} – Turbo Pascal Typ EXTENDED.

Je nach Anwendnung kann das Newton–Verfahren mit dem Intervallhalbierungsverfahren kombiniert werden, so daß die x-Werte nicht aus einem gewünschten Bereich herauslaufen.

Bei der Muellerschen iterativen Methode sind zwei die Nullstelle einschließende Startwerte nötig. Im Gegensatz hierzu kommt man beim Newton–Verfahren mit einem Startwert aus, der lediglich hinreichend nahe an der Nullstelle liegen muß. Wie bei der Muellerschen iterativen Methode ist es möglich, das Iterationsverfahren nach Newton mit einem Bisektionsverfahren zu kombinieren, um zu garantieren, daß die x-Werte nicht aus einem gewünschten Bereich herauslaufen. Beim Newton–Verfahren sind hierzu die Funktionswerte an den Bereichsgrenzen nicht nötig. Speziell bei der Nullstellensuche des effektiven Potentials ohne Langer–Transformation hat sich dieses modifiziertes Newton–Verfahren überlegen gezeigt.

6.2 Gauss–Mehler–Integrationen

Um numerisch WKB–Quantisierungsbedingungen lösen zu können, müssen bestimmte Integrale zwischen den Nullstellen des Integranden berechnet werden. Bei WKB–Integralen der Dirac–Theorie müssen Funktionen integriert werden, deren Struktur vergleichbar mit $V_{eff} - E$ (vergleiche Bild) aus der Schrödinger–Theorie sind.



Integralmethoden mit maximalem Genauigkeitsgrad, durch geeignete Stützstellen- und Gewichtewahl, sind die Gaußschen Quadraturformeln [18]. Dabei sind die Stützstellen gerade die Nullstellen von entsprechenden orthogonalen Polynomen. Man kann beweisen, daß der höchste Genauigkeitsgrad für Legendre–Polynome erreicht wird.

In der Praxis ist es aber günstiger Chebyshev–Polynome **(Anhang E)** als orthogonale Polynome zu verwenden, da dessen Nullstellen einfacher zu handhaben sind. Dabei sinkt der Genauigkeitsgrad nur unwesentlich. In den diskutierten WKB–Verfahren treten WKB–Integrale in zwei verschiedenen Formen auf:

$$1) \quad \int_{r_1}^{r_2} dr \, \frac{s(r)}{\sqrt{Q(r)}} \qquad 2) \quad \int_{r_1}^{r_2} dr \; s(r)\sqrt{Q(r)} \tag{6.45}$$

wobei jeweils $Q(r_{1,2}) = 0$ gilt. Die beiden Fälle werden im Anschluß getrennt behandelt.

6.2.1 Stützstellenwahl mittels Chebyshev I

Für ein Integral vom Typ 1) ist es günstig, Chebyshev–Polynome der ersten Art als orthogonale Polynome bei der Gauss–Mehler–Integration zu verwenden [1](25.4.38)ff.

$$\int_{r_1}^{r_2} dr \, \frac{s(r)}{\sqrt{(r-r_1)(r_2-r)}} \sqrt{\frac{(r-r_1)(r_2-r)}{Q(r)}} \tag{6.46}$$

Dabei ist zu beachten, daß

$$\sqrt{\frac{(r-r_1)(r_2-r)}{Q(r)}} \tag{6.47}$$

beschränkt bleibt, da Zähler und Nenner an denselben Stellen verschwinden. Mit der Definition

$$f(r) \equiv s(r)\sqrt{\frac{(r-r_1)(r_2-r)}{Q(r)}} \tag{6.48}$$

schreibt sich die Quadraturformel

$$\int_{r_1}^{r_2} dr\ \frac{s(r)}{\sqrt{Q(r)}} = \int_{r_1}^{r_2} dr\ \frac{f(r)}{\sqrt{(r-r_1)(r_2-r)}} \approx \sum_{j=1}^{K} w_j f(y_j) \tag{6.49}$$

mit dem Gewicht

$$w_j = \frac{\pi}{K} \tag{6.50}$$

und den Stützstellen

$$y_j = \frac{r_2+r_1}{2} + \frac{r_2-r_1}{2}\cos\left(\frac{(2j-1)\pi}{2K}\right) \tag{6.51}$$

Wegen

$$(y_j-r_1)(r_2-y_j) = \left(\frac{r_2-r_1}{2}\right)^2 \sin^2\left(\frac{(2j-1)\pi}{2K}\right) \tag{6.52}$$

kann die Funktion $f(y_j)$ an den Stützstellen zum Teil ausgewertet werden, wodurch sich die Quadraturformel vereinfacht.

$$f(y_j) = \frac{s(y_j)}{\sqrt{Q(y_j)}}\frac{r_2-r_1}{2}\sin\left(\frac{(2j-1)\pi}{2K}\right) \tag{6.53}$$

$$\boxed{\int_{r_1}^{r_2} dr\ \frac{s(r)}{\sqrt{Q(r)}} \approx \frac{\pi(r_2-r_1)}{2K}\sum_{j=1}^{K}\frac{\sin\left(\frac{(2j-1)\pi}{2K}\right)s(y_j)}{\sqrt{Q(y_j)}}} \tag{6.54}$$

Gauss–Quadratur mittels Chebyshev I

6.2.2 Stützstellenwahl mittels Chebyshev II

Um eine Gauss–Quadraturformel auf den Integraltyp 2) anwenden zu können, bezieht man sich auf die orthogonalen Chebyshev–Polynome zweiter Art. Bevor jedoch die Quadraturformel [1] (25.4.41) verwendet wird, formt man wie zuvor das Integral gemäß

$$\int_{r_1}^{r_2} dr\ s(r)\sqrt{Q(r)} = \int_{r_1}^{r_2} s(r)\sqrt{(r-r_1)(r_2-r)}\sqrt{\frac{Q(r)}{(r-r_1)(r_2-r)}} \tag{6.55}$$

um.

$$f(r) \equiv s(r)\sqrt{\frac{Q(r)}{(r-r_1)(r_2-r)}} \tag{6.56}$$

$$\int_{r_1}^{r_2} dr\ s(r)\sqrt{Q(r)} = \int_{r_1}^{r_2} dr\ f(r)\sqrt{(r-r_1)(r_2-r)} \approx \left(\frac{r_2-r_1}{2}\right)^2 \sum_{j=1}^{K} w_j f(y_j) \tag{6.57}$$

mit den Gewichten

$$w_j = \frac{\pi}{K+1}\sin^2\left(\frac{j\pi}{K+1}\right) \tag{6.58}$$

und den Stützstellen,

$$y_j = \frac{r_2+r_1}{2} + \frac{r_2-r_1}{2}\cos\left(\frac{j\pi}{K+1}\right) \tag{6.59}$$

$$(y_j-r_1)(r_2-y_j) = \left(\frac{r_2-r_1}{2}\right)^2 \sin^2\left(\frac{j\pi}{K+1}\right) \tag{6.60}$$

so daß die Gauss–Quadraturformel in diesem Fall lautet

$$\boxed{\int_{r_1}^{r_2} dr\ s(r)\sqrt{Q(r)} \approx \frac{(r_2-r_1)\pi}{2(K+1)} \sum_{j=1}^{K} s(y_j)\sqrt{Q(y_j)}\sin\left(\frac{j\pi}{K+1}\right)} \tag{6.61}$$

Gauss–Quadratur mittels Chebyshev II

6.2.3 Programmtechnische Realisierung

Die Kontrolle über die Genauigkeit der Integrationsformel kann über das Restglied nur schwer realisiert werden, da hierzu höhere Ableitungen des Integranden benötigt werden. Eine praktizierbare Fehlerkontrolle nutzt das Prinzip der Fehlerkorrelation aus. Erhöht man die Stützstellenzahl bei der Berechnung des Integrals, so ist auch ein genaueres Ergebnis zu erwarten. Der Vergleich von Integralergebnissen mit zwei verschiedenen Stützstellenzahlen läßt einen Rückschluß auf die Genauigkeit zu.

```
            Ausgabefile : gm1.pas
function int_GM1(x1, x2   : extended; { Integralgrenzen    }
                 Radikant : funkt;    { Integrand          }
                 genau    : extended  { Genauigkeit        }
                 ):extended;

{***********************************************************************}
{*  Integriert die Wurzel aus radikant zwischen dessen Nullstellen     *}
{***********************************************************************}

var j,K         : longint;     { K : Anzahl der Stuetzstellen }
    ineu,ialt   : extended;    { neuer und alter Integralwert }
    h1,h2,h3,h4 : extended;    { Hilfsvariablen               }

begin
  K := 100;
  ineu := 0;
  for j := 1 to K do
  Begin
    h1 := sin(pi*j/(k+1));
    h2 := (x1+x2)/2;
    h3 := (x2-x1)/2;
    h4 := cos(pi*j/(k+1));
    h3 := h3*h4;
    h3 := h2+h3;
    h2 := radikant(h3);
    h2 := sqrt(abs(h2/(x2-h3)/(h3-x1)));
    ineu := ineu + sqr(h1)*h2;
  end;
  ineu := ineu*pi*(x2-x1)*0.5/(K+1);

{***********************************************************************}
{* Der erste Integralwert ist berechnet. Damit eine Aussage ueber die  *}
{* Genauigkeit gemacht werden kann wird die Stuetzstellenzahl erhoeht  *}
{* und der neue Integralwert mit dem Alten verglichen                  *}
{***********************************************************************}

  repeat
    ialt := ineu;
    K := K+K;
    ineu := 0;
    for j := 1 to K do
    Begin
      h1 := sin(pi*j/(k+1));
      h2 := (x1+x2)/2;
      h3 := (x2-x1)/2;
      h4 := cos(pi*j/(k+1));
      h3 := h3*h4;
      h3 := h2+h3;
      h2 := radikant(h3);
      h2 := sqrt(abs(h2/(x2-h3)/(h3-x1)));
      ineu := ineu + sqr(h1)*h2;
    end;
    ineu := ineu*pi*sqr((x2-x1)*0.5)/(K+1);
    ialt := abs(ialt-ineu);
  until abs(ialt) < genau;
  int_gm1 := ineu;
end;
```

```
            Ausgabefile : E:\gm2.pas
function int_GM2(x1,x2     : extended; { Integralgrenzen }
                 Integrand : funkt;    { Integrand       }
                 genau     : extended  { Genauigkeit     }
                 ):extended;

{************************************************************************}
{*          Integriert Integrand zwischen dessen Polen                  *}
{************************************************************************}

var j,K         : longint;   { K : Anzahl der Stuetzstellen }
    ineu,ialt   : extended;  { neuer und alter Integralwert }
    h1,h2,h3,h4 : extended;  { Hilfsvariablen               }

begin
  K := 100;
  ineu := 0;
  for j := 1 to K do
  Begin
    h2 := (x1+x2)/2;
    h3 := (x2-x1)/2;
    h4 := cos(pi*(j-0.5)/k);
    h3 := h3*h4;
    h3 := h2+h3;
    h2 := Integrand(h3);
    h2 := sin(Pi*(j-0.5)/k)*h2;
    ineu := ineu + h2;
  end;
  ineu := ineu*pi*(x2-x1)*0.5/K;

{************************************************************************}
{* Der erste Integralwert ist berechnet. Damit eine Aussage ueber die  *}
{* Genauigkeit gemacht werden kann wird die Stuetzstellenzahl erhoeht  *}
{* und der neue Integralwert mit dem Alten verglichen                  *}
{************************************************************************}

  repeat
    ialt := ineu;
    K := K+K;
    ineu := 0;
    for j := 1 to K do
    begin
      h2 := (x1+x2)/2;
      h3 := (x2-x1)/2;
      h4 := cos(pi*(j-0.5)/k);
      h3 := h3*h4;
      h3 := h2+h3;
      h2 := Integrand(h3);
      h2 := sin(Pi*(j-0.5)/k)*h2;
      ineu := ineu + h2;
    end;
    ineu := ineu*pi*(x2-x1)*0.5/K;
    ialt := abs(ialt-ineu);
  until ialt < genau;
  int_gm2 := ineu;
end;
```

Kapitel 7

Numerische WKB–Rechnungen

Die numerische Auswertung von WKB–Quantisierungsbedingungen kann formal für alle von mir untersuchten WKB–Verfahren auf ein Invertierungsproblem zurückgeführt werden. Die jeweils zu untersuchende WKB–Quantisierungsbedingung legt eine Funktion fest, welche außer von der Struktur der WKB–Näherung im wesentlichen von einer Quantenzahl ν und der zugehörigen Energie abhängt. Ferner sei die Funktion derart festgelegt, daß die Quantisierungsbedingung sich in äquivalenter Weise schreiben läßt als

$$F(E,\nu) = \mathcal{F}(E) - f(\nu) = 0 \tag{7.1}$$

so daß die Berechnung der Energie zu einer Quantenzahl ν äquivalent ist zu der Inversion der Funktion $\mathcal{F}$

$$\mathcal{F}(E) = f(\nu) \tag{7.2}$$

$$\Longleftrightarrow \; E = \left(\mathcal{F}^{-1} \circ f\right)(\nu) \tag{7.3}$$

Numerisch kann dieses Problem als Nullstellensuche der Funktion F aufgefaßt werden. Gibt man sich die Quantenzahl ν fest vor, so ist F nur noch eine Funktion der Energie. Mit einem geeigneten Algorithmus zur Bestimmung von Nullstellen muß nun die Energie gefunden werden für die die Funktion F verschwindet. Die von mir hierzu verwendeten Algorithmen habe ich im vorigen Kapitel vorgestellt.

Für die untersuchten WKB–Verfahren läßt sich die Form der Funktion $\mathcal{F}$ noch näher spezifizieren. Definiert man geeignet eine Funktion $A(E,x,V)$, die, außer vom speziellen WKB–Verfahren, noch von der Energie, von einer Radialvariablen und natürlich vom Potential abhängt, so kann die Funktion $\mathcal{F}$ geschrieben werden als

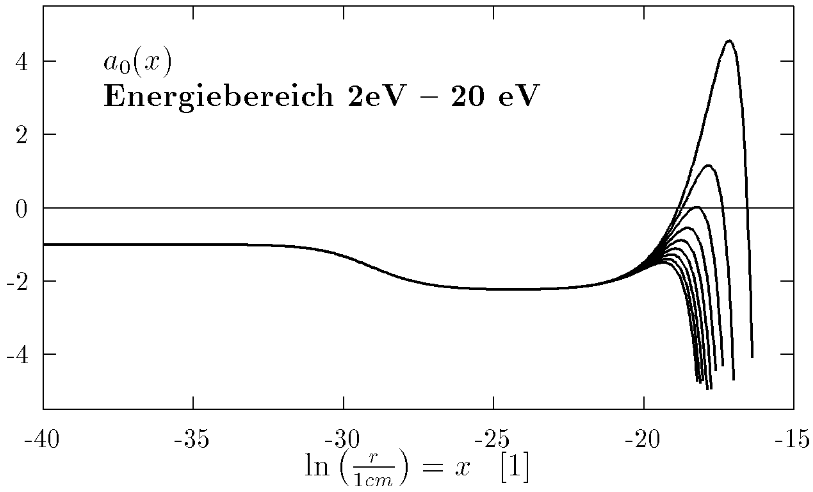
$$\mathcal{F}(E) = \int\limits_{x_1}^{x_2} dx \; A(E,x,V) \tag{7.4}$$

Die Integralgrenzen sind die beiden Nullstellen der Funktion A beziehungsweise Näherungen der Nullstellen von A. Die Funktion F wird im weiteren als WKB–Funktion bezeichnet.

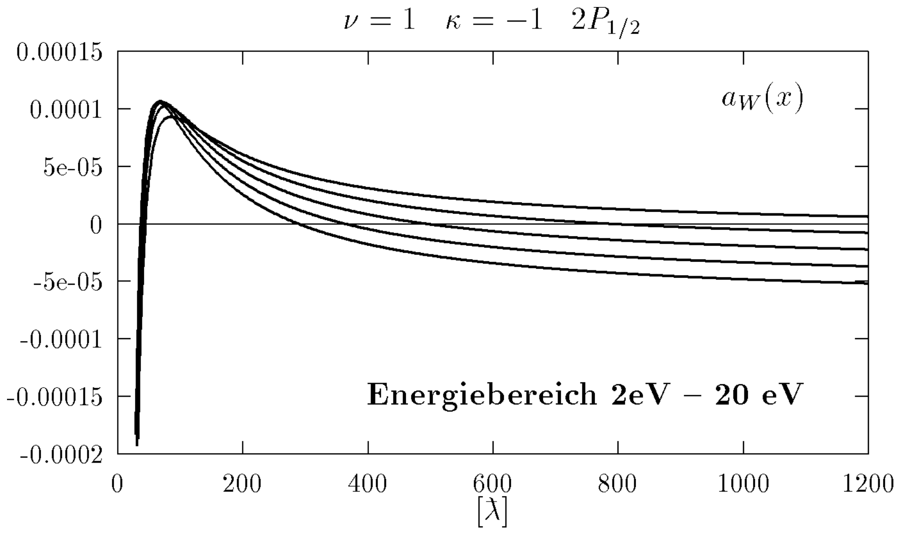
7.1 Bestimmung der Integralgrenzen

Falls die Energie bereits die gesuchte Quantenenergie ist, sind die Integralgrenzen sind die beiden Nullstellen einer von der Energie abhängigen Funktion . Ist die Energie weit von der gesuchten Energie entfernt, so kann das Maximum kleiner als Null werden, wodurch die Nullstellen verschwinden. Dieses Verhalten ist je nach WKB–Verfahren mehr oder weniger stark ausgeprägt. Im Fall des globalen WKB–Verfahrens, wie ich es in Kapitel **(4.3)** vorgestellt habe, ist dieses Verhalten stark ausgeprägt und kompliziert die numerischen Rechnungen. Wenn keine Nullstellen vorhanden sind, kann keine WKB–Funktion berechnet werden. Deshalb müssen entsprechende Routinen einen Absturz des Programms vermeiden und die Energie hin zur gesuchten Energie verändern. Untersuchungen am Beispiel des Coulomb–Potentials zeigen besonders für den $2P_{1/2}$ Zustand dieses Problem (vergleiche Abbildung).

$\nu = 1 \quad \kappa = -1 \quad 2P_{1/2}$



Entsprechende Graphen für das Whittaker–WKB–Verfahren lassen erkennen, daß dieses Problem unter gleichen Voraussetzungen nicht auftritt. Somit ist das Whittaker–WKB–Verfahren von der numerischen Handhabung her gesehen favorisiert.



In beiden Abbildungen gehören Kurven mit hohem Maximum zu einem großen Energiewert und umgekehrt.

Falls zwei Nullstellen vorliegen, können Algorithmen zur Bestimmung von Nullstellen nur dann sicher beide Nullstellen finden, wenn zwei disjunkte Intervalle an den Algorithmus übergeben werden, die je eine Nullstelle enthalten. Da zwischen zwei Nullstellen eine Extremstelle liegt, teilt diese den Definitionsbereich in zwei Intervalle $I_<$ und $I_>$ auf, welche die geforderten Bedingungen erfüllen. Übergibt man diese Intervalle $I_<$ und $I_>$ dem modifizierten Newton–Algorithmus, so ist sichergestellt, daß keine Nullstelle doppelt berechnet wird.

Zur Berechnung des Maximums x_m wird benutzt, daß für hinreichend kleines $\varepsilon > 0$ die untersuchte Funktion jeweils auf $I_< \cap U_\varepsilon(x_m)$ und $I_> \cap U_\varepsilon(x_m)$ monoton ist. Für die untersuchten Funktionen kann ε wenigstens einseitig sehr groß gewählt werden. Der verwandte Algorithmus kann wie folgt beschrieben werden:

1. Startwert x_m auf der x-Achse wählen und den Funktionswert dazu berechnen

2. Startgenauigkeit δ wählen

3. Vergleichswerte $x_0 = x_1 - \delta$, $x_1 = x_m$, $x_2 = x_1 + \delta$ mit Funktionswerten berechnen

4. Neuen Maxmimalwert x_m aus x_0 bis x_2 herausfinden und in eine Schlange mit drei Elementen eintragen

5. Neue x-Werte berechnen gemäß $x_0 = x_m - \delta$, $x_1 = x_m$, $x_2 = x_m + \delta$

6. Falls erster und letzter Eintrag in der Schlange höchstens δ auseinanderliegen so wird δ halbiert

7. fahre fort mit 3. bis δ die gewünschte Genauigkeit erreicht hat.

```
             Ausgabefile : max.pas
function max:extended;

{*********************************************************************}
{* Funktion zur Berechnung des Maximums der Funktion a(x)            *}
{* Je nach Anwendung (mit oder ohne Langer-Transformation) wird als    *}
{* untere Schranke die Null verwendet. Ebenfalls ist Startgenauigkeit  *}
{* auf das aktuelle Problem anzupassen. Die Maximumsuche fuehrt mit    *}
{* Sicherheit zum richtigen Ergebnis, falls die untersuchte Funktion   *}
{* links und rechts vom Maximum monoton ist.                           *}
{*********************************************************************}

const draw = false;

var x1,x2,x3,ax1,ax2,ax3 : extended;  { x Werte und Funktionswerte  }
    m1,m2,m3,am          : extended;  { die letzten drei Maxima     }
    eps,delta            : extended;  { eps : gewuenschte Genauigk. }
                                      { delta : moment. Genauigk.   }

begin
  delta := 1;
  x1 := 30;            ax1 := a(x1);
  x2 := x1 + delta;    ax2 := a(x2);
  x3 := x1 + 2*delta; ax3 := a(x3);
  eps := 1e-8; m2 := 1; m3 := 1;
  Repeat
    m1 := m2; m2 := m3; m3 := x2;
    am := ax2;
    if ax1 > am Then begin m3 := x1; am := ax1; end;
    if ax3 > am Then begin m3 := x3; am := ax3; end;
    if abs(m1-m3) <= delta then delta := delta * 0.5;
    x1 := m3 - delta; If x1 <= 0 Then x1 := m3/2;
    x3 := m3 + delta;
    x2 := m3;
    ax1 := a(x1); ax2 := am; ax3 := a(x3);
  Until delta <= eps;
```

```
              Ausgabefile : max.pas
{********************************************************************}
{* Der globalen Variablen max_hoch wird der Funktionswert im Maximum   *}
{* uebergeben. Somit kann geprueft werden ob Nullstellen vorliegen.    *}
{********************************************************************}
  max_hoch := am;
  max := m3;
end;
```

Es sei nochmals betont, daß die Nullstellen von der Energie abhängen. Das heißt: Für jeden Energiewert müssen die Integralgrenzen und das Integral neu berechnet werden! Die Integrale habe ich mit den im letzten Kapitel beschriebenen Gauss–Mehler–Algorithmen berechnet. Die Graphen einiger der zu integrierenden Funktionen habe ich zu den Quantenenergien berechnet, sie sind in den folgenden Abschnitten dargestellt.

7.1.1 Graphen von $a_W(x)$

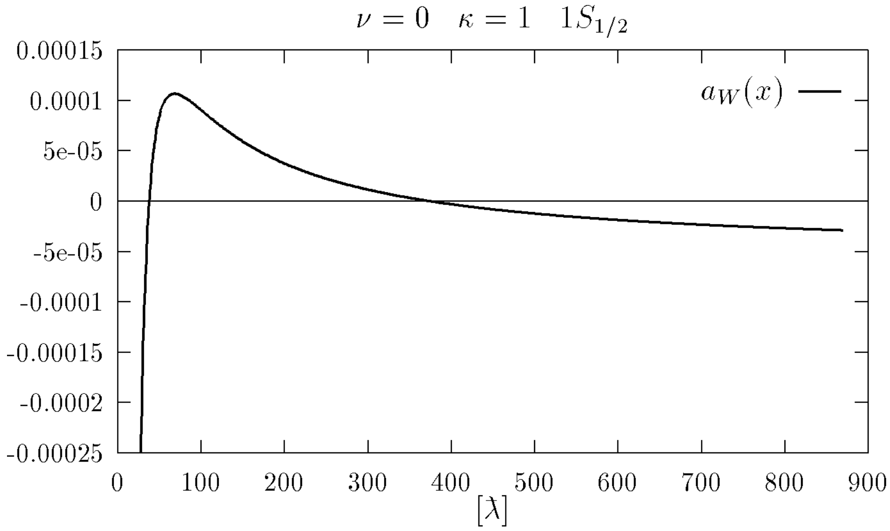
$a_W(x)$ sind die zu integrierenden Funktion, falls das Whittaker–WKB–Verfahren benutzt wird. Zur Erinnerung sei an dieser Stelle $a_W(x)$ nochmals aufgeführt.

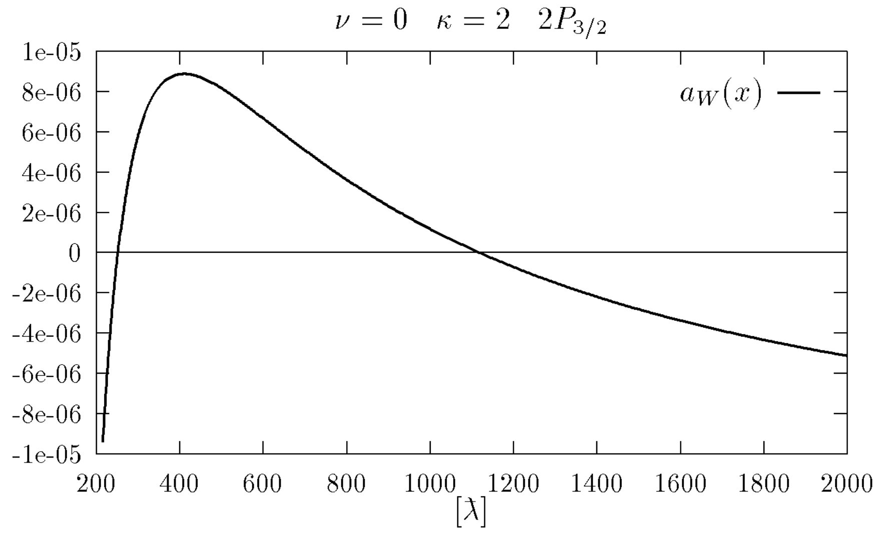
$$\boxed{a(x) = -\frac{1}{2}\frac{\partial_x^2 B}{B-1} - \frac{5}{4}\left(\frac{\partial_x B}{B-1}\right)^2 - \frac{\partial_x B}{B-1}A + \partial_x A + (\varepsilon - W)^2 - \frac{\varkappa^2}{x^2} - 1} \tag{7.5}$$

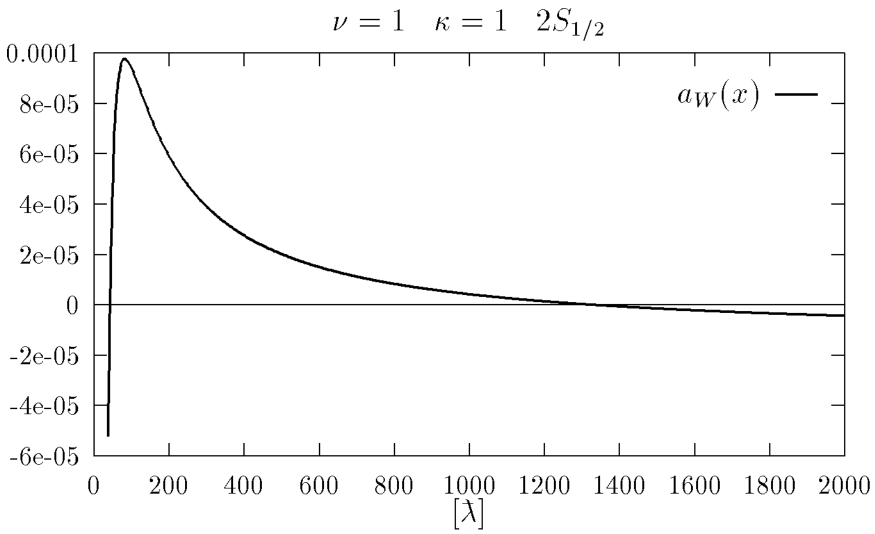
$$A = \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\varepsilon}(\varepsilon - W) + \frac{\varkappa}{\varepsilon x} \tag{7.6}$$

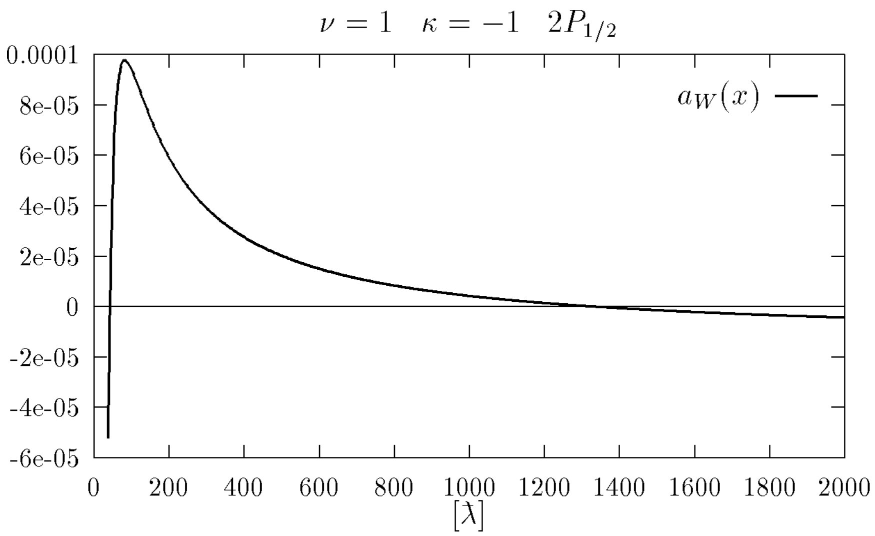
$$B = \frac{\varepsilon - W}{\varepsilon} + \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\varepsilon}\frac{\varkappa}{x} \tag{7.7}$$

Als Potential habe ich für die Abbildungen das Coulomb–Potential verwendet.

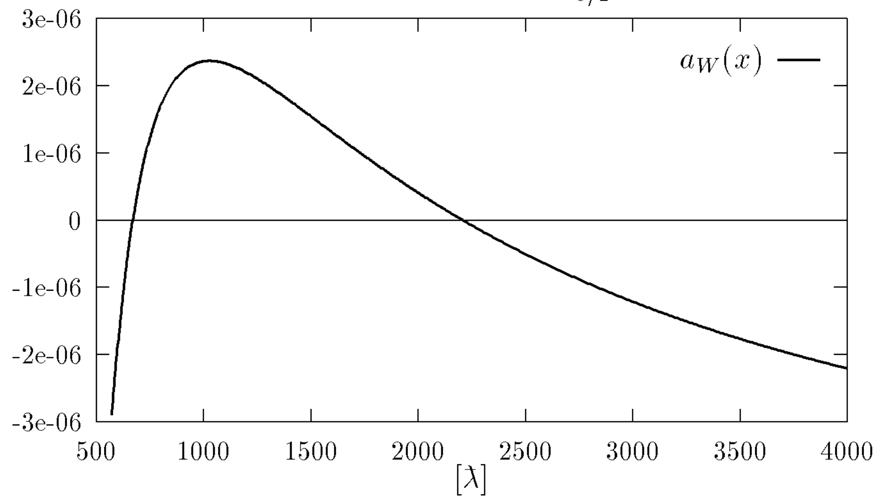



$\nu = 0 \quad \kappa = 2 \quad 2P_{3/2}$
$a_W(x)$
1e-05
8e-06
6e-06
4e-06
2e-06
0
-2e-06
-4e-06
-6e-06
-8e-06
-1e-05
200 400 600 800 1000 1200 1400 1600 1800 2000
[λ]

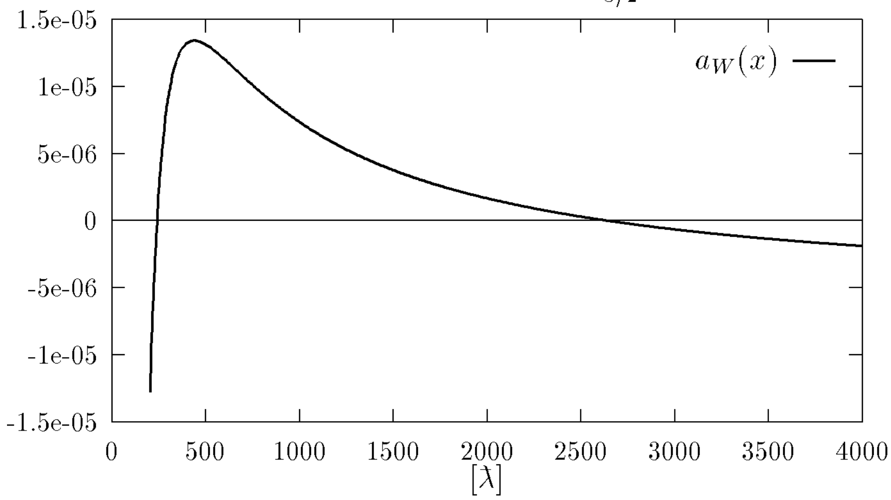

$\nu = 1 \quad \kappa = 1 \quad 2S_{1/2}$
$a_W(x)$
0.0001
8e-05
6e-05
4e-05
2e-05
0
-2e-05
-4e-05
-6e-05
0 200 400 600 800 1000 1200 1400 1600 1800 2000
[λ]


$\nu = 1 \quad \kappa = -1 \quad 2P_{1/2}$
$a_W(x)$
0.0001
8e-05
6e-05
4e-05
2e-05
0
-2e-05
-4e-05
-6e-05
0 200 400 600 800 1000 1200 1400 1600 1800 2000
[λ]

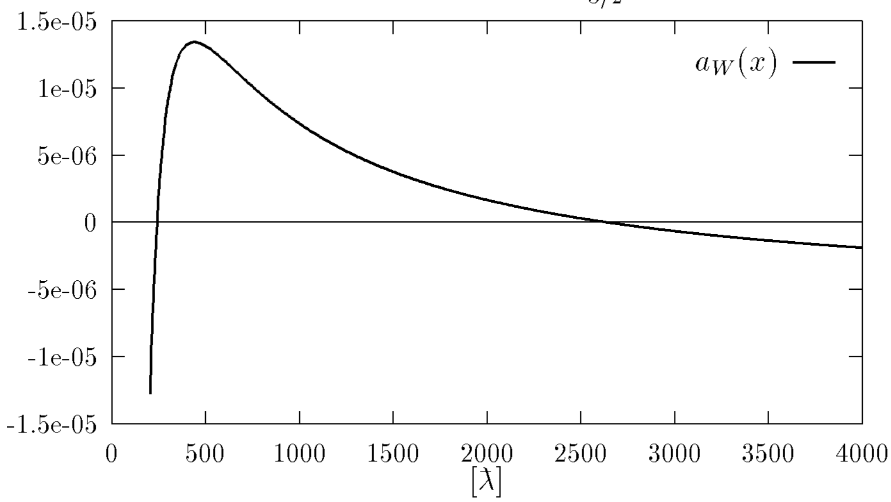
$\nu = 0 \quad \kappa = 3 \quad 3D_{5/2}$

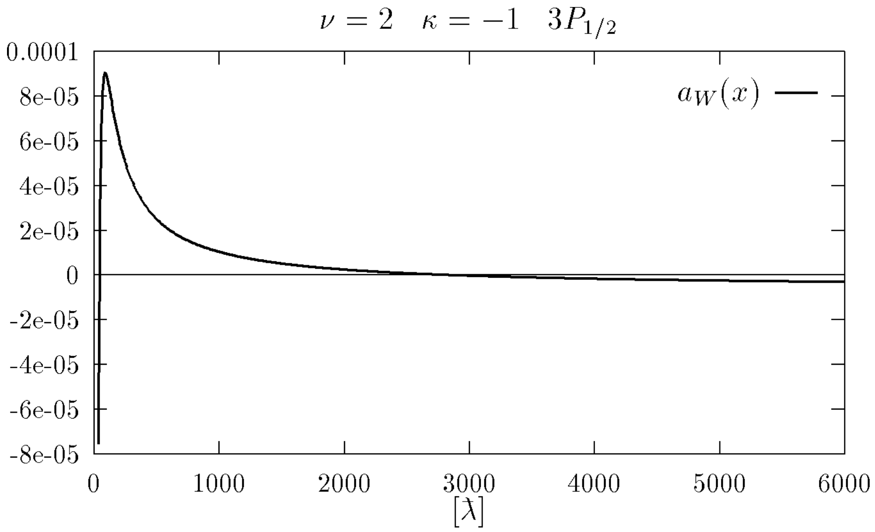


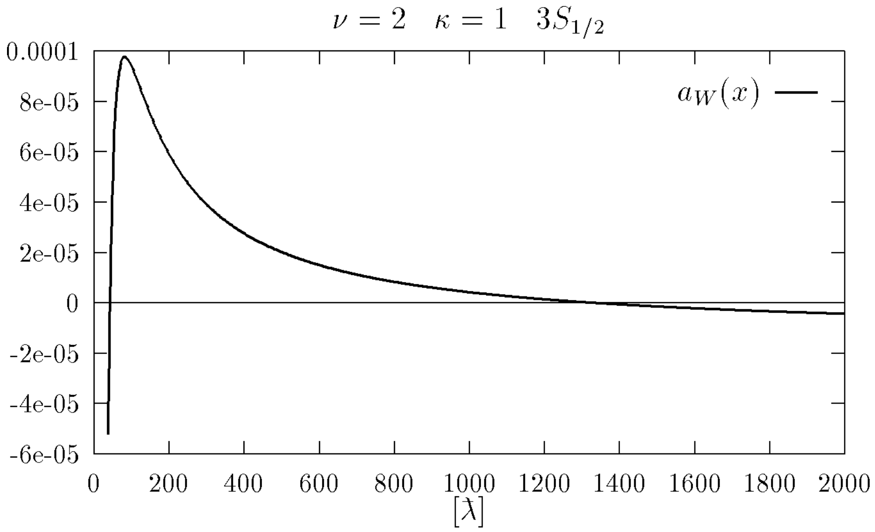
$\nu = 1 \quad \kappa = -2 \quad 3D_{3/2}$



$\nu = 1 \quad \kappa = 2 \quad 3P_{3/2}$



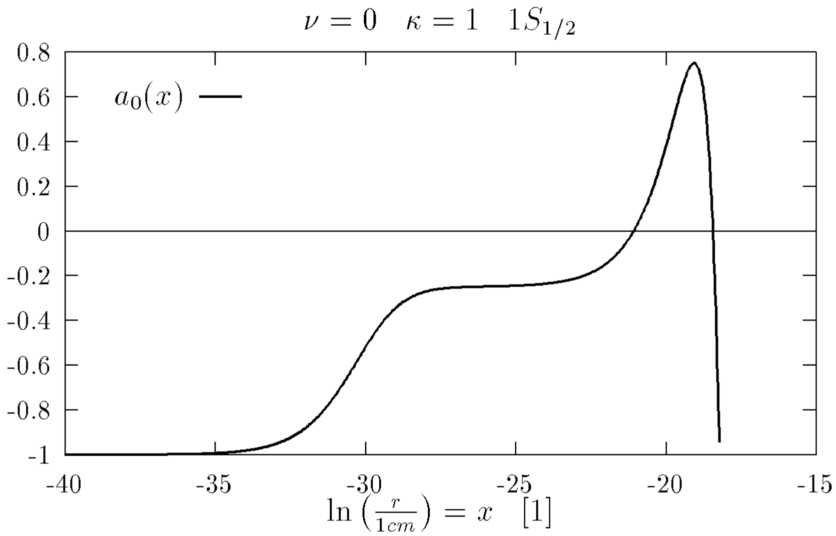


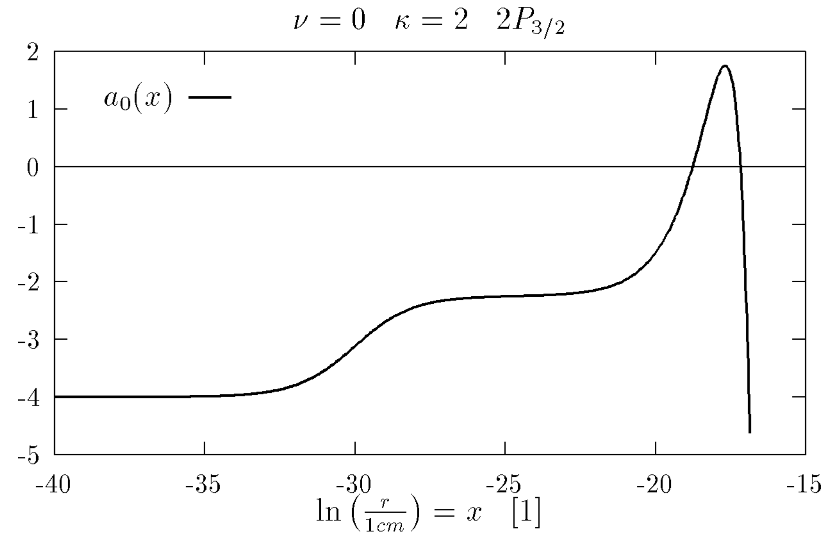


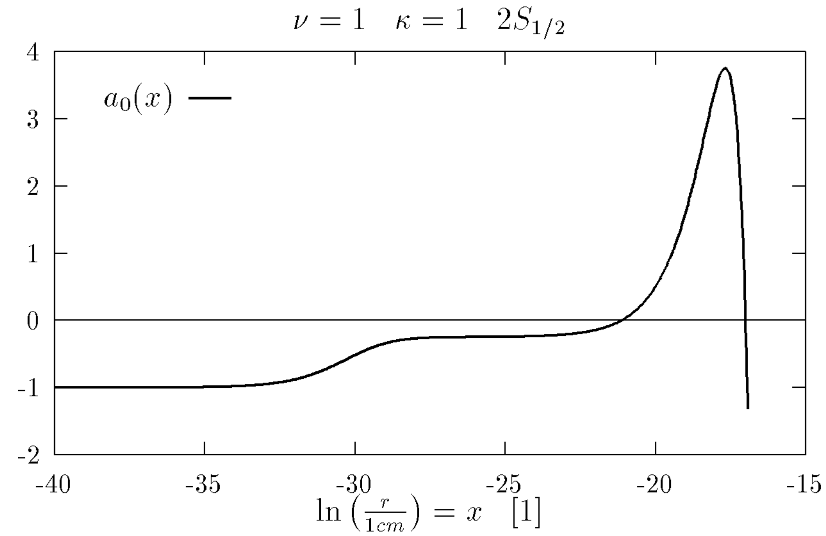
7.2 Graphen von $a_0(x)$

$a_0(x)$ wird bei dem globalen WKB–Verfahren verwendet.

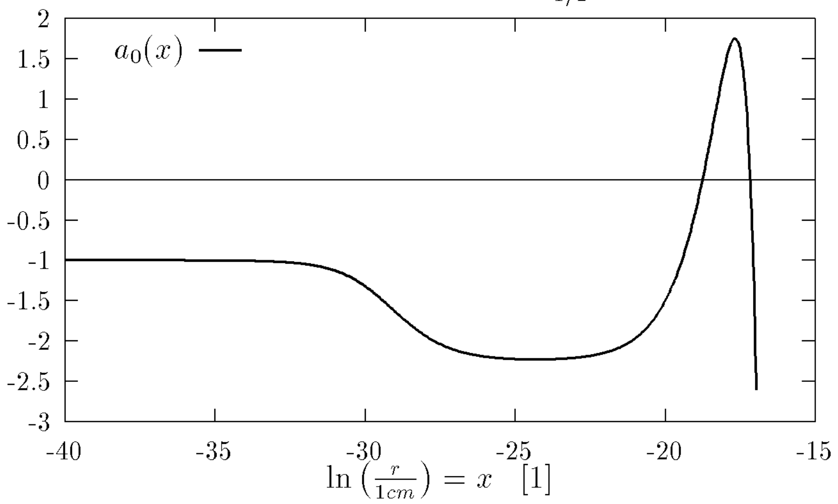
$$\begin{aligned} a_0(x) &= \frac{e^{2x}}{\lambda^2}\left[(\varepsilon - W)^2 - 1\right] - (\varkappa - \frac{1}{2})^2 + (\varkappa - \frac{1}{2})\frac{\partial_x \phi}{\phi} \\ &+ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial_x^2 \phi}{\phi} - \frac{3(\partial_x \phi)^2}{2\phi^2}\right) \end{aligned} \tag{7.8}$$


$\nu = 0 \quad \kappa = 1 \quad 1S_{1/2}$
$a_0(x)$
0.8
0.6
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
-0.6
-0.8
-1
-40
-35
-30
-25
-20
-15
$\ln\left(\frac{r}{1cm}\right) = x \quad [1]$

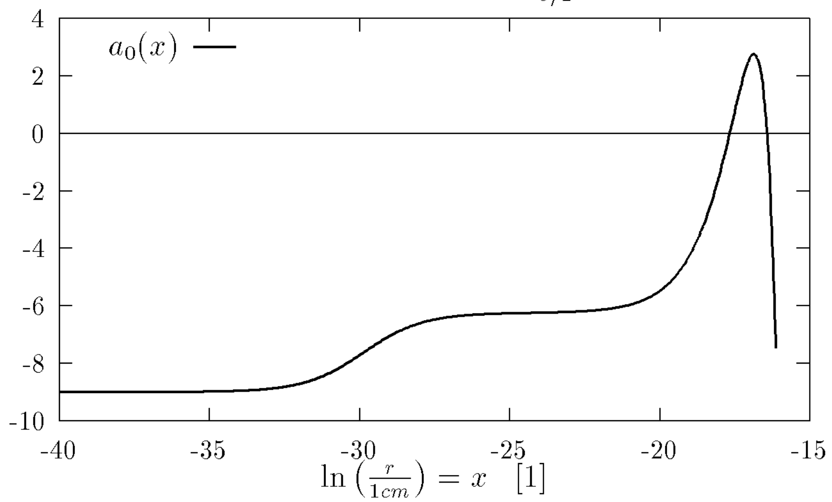

$\nu = 0 \quad \kappa = 2 \quad 2P_{3/2}$
$a_0(x)$
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-5
-40
-35
-30
-25
-20
-15
$\ln\left(\frac{r}{1cm}\right) = x \quad [1]$


$\nu = 1 \quad \kappa = 1 \quad 2S_{1/2}$
$a_0(x)$
4
3
2
1
0
-1
-2
-40
-35
-30
-25
-20
-15
$\ln\left(\frac{r}{1cm}\right) = x \quad [1]$

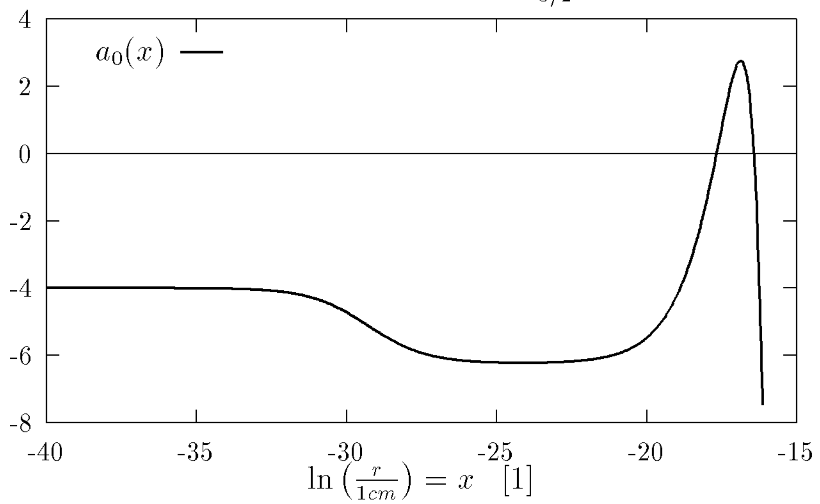
$\nu = 1 \quad \kappa = -1 \quad 2P_{1/2}$

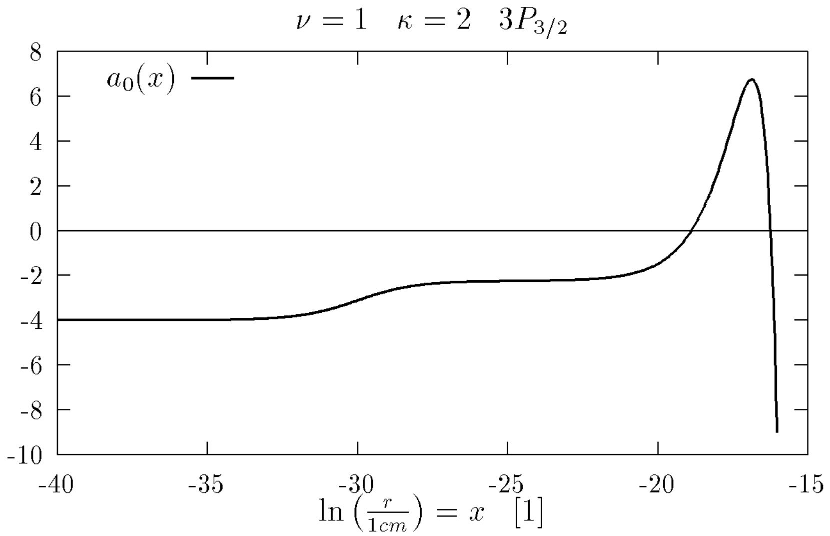


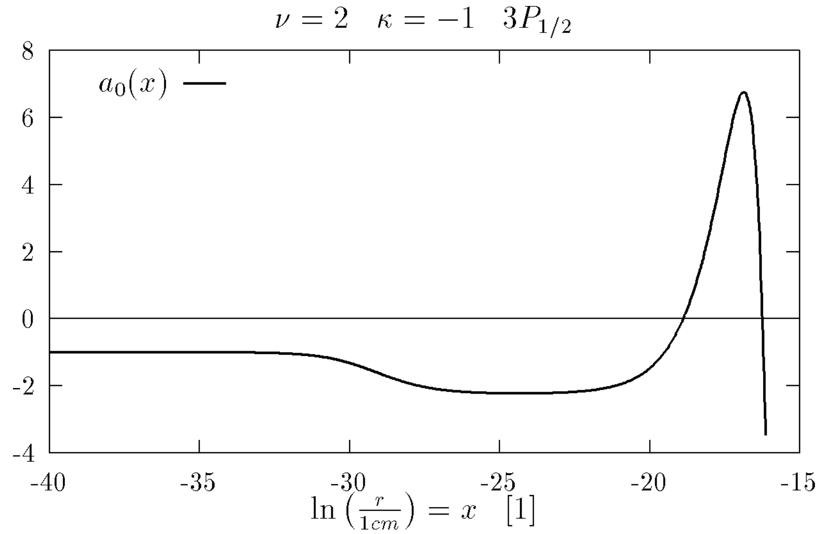
$\nu = 0 \quad \kappa = 3 \quad 3D_{5/2}$

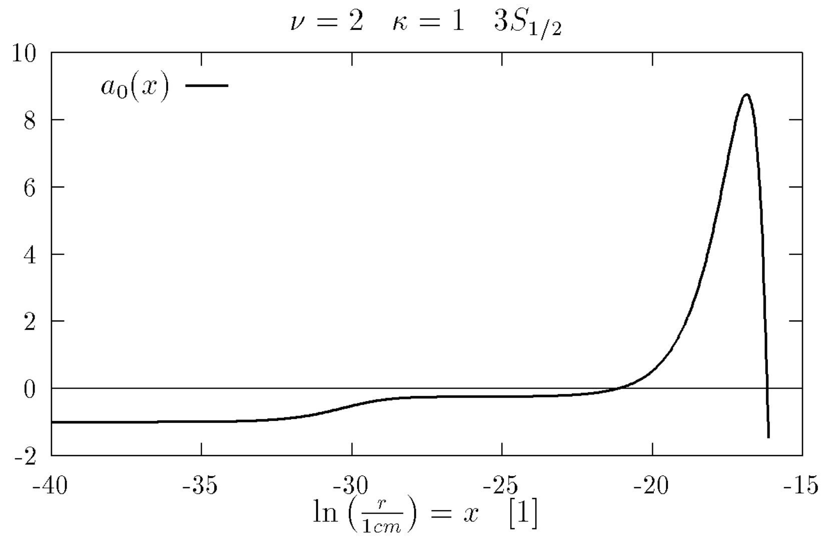


$\nu = 1 \quad \kappa = -2 \quad 3D_{3/2}$



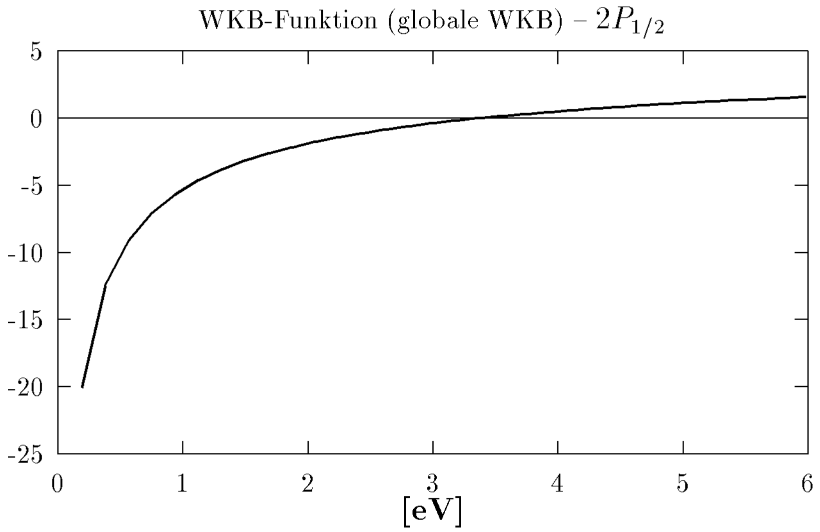

$\nu = 1 \quad \kappa = 2 \quad 3P_{3/2}$
$a_0(x)$
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
-10
-40
-35
-30
-25
-20
-15
$\ln\left(\frac{r}{1cm}\right) = x \quad [1]$

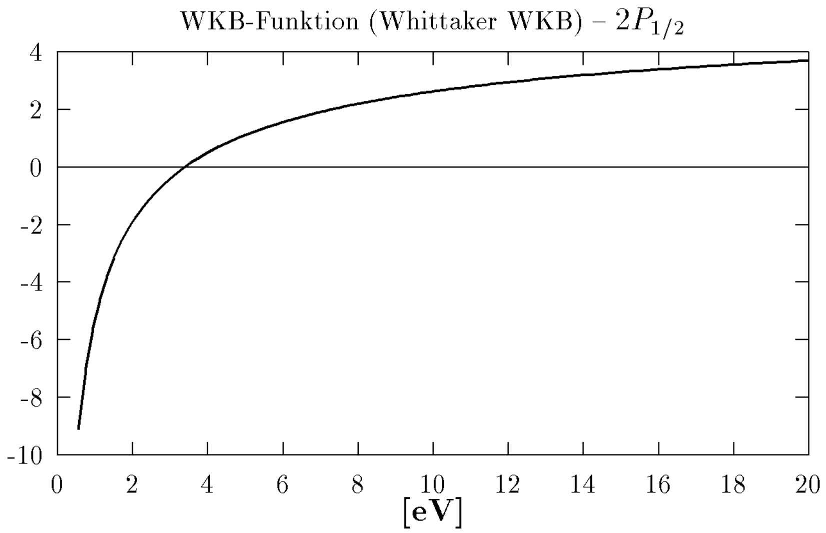

$\nu = 2 \quad \kappa = -1 \quad 3P_{1/2}$
$a_0(x)$
8
6
4
2
0
-2
-4
-40
-35
-30
-25
-20
-15
$\ln\left(\frac{r}{1cm}\right) = x \quad [1]$


$\nu = 2 \quad \kappa = 1 \quad 3S_{1/2}$
$a_0(x)$
10
8
6
4
2
0
-2
-40
-35
-30
-25
-20
-15
$\ln\left(\frac{r}{1cm}\right) = x \quad [1]$

7.3 Nullstellen der WKB–Funktion

Die WKB–Funktionen sind monoton über ihrem Definitionsgebiet. Um eine bessere Vorstellung von diesen Funktionen zu bekommen, seien auch hier exemplarisch einige Funktionsgraphen dargestellt.





Funktionen mit einem derartigen Verhalten können problemlos mit einem Newton–Verfahren behandelt werden.

7.4 Numerische Ergebnisse

Zu den in Kapitel **(4.3)** vorgestellten WKB–Verfahren habe ich für das Coulomb–Potential numerische Rechnungen durchgeführt. Im Gegensatz zu den Rechnungen für das Whittaker–WKB–Verfahren sind alle globalen WKB–Verfahren für das Coulomb–Potential nicht exakt.

$$\int_{x_1}^{x_2} dx \, \sqrt{a(x)} = \pi \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \tag{7.9}$$

x_1 und x_2 sind die Nullstellen von $a(x)$. WKB 0, WKB 1 und WKB 2 unterscheiden sich durch modifizierte Funktionen $a(x)$.

$$\begin{aligned} a(x) &= \frac{e^{2x}}{\lambda^2}\left[(\varepsilon - W)^2 - 1\right] - (\varkappa - \frac{1}{2})^2 + (\varkappa - \frac{1}{2})\frac{\partial_x \phi}{\phi} \\ &+ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial_x^2 \phi}{\phi} - \frac{3(\partial_x \phi)^2}{2\phi^2}\right) \end{aligned} \tag{7.10}$$

WKB 0

$$a(x) = \frac{e^{2x}}{\lambda^2}\left[(\varepsilon - W)^2 - 1\right] - (\varkappa - \frac{1}{2})^2 + (\varkappa - \frac{1}{2})\frac{\partial_x \phi}{\phi} \tag{7.11}$$

WKB 1

$$\begin{aligned} \sqrt{a(x)} &= \sqrt{\frac{e^{2x}}{\lambda^2}\left[(\varepsilon - W)^2 - 1\right] - (\varkappa - \frac{1}{2})^2} \\ &+ \frac{\left(\varkappa - \frac{1}{2}\right)\partial_x \phi}{2\phi\sqrt{\frac{e^{2x}}{\lambda^2}\left[(\varepsilon - W)^2 - 1\right] - (\varkappa - \frac{1}{2})^2}} \end{aligned} \tag{7.12}$$

WKB 2

Hier sind x_1 und x_2 die Nullstellen der Wurzel.

ν	ν_{WKB}	$\varkappa$	Bez.	Sommerfeld	WKB 2	WKB 1	WKB 0
0	0	1	$1S_{1/2}$	13.605902033666354300	13.605177376 Δ $7.2466 \cdot 10^{-4}$ δ $5.32635 \cdot 10^{-5}$	13.605177925 Δ $7.2411 \cdot 10^{-4}$ δ $5.32203 \cdot 10^{-5}$	13.606626335 Δ $7.243 \cdot 10^{-4}$ δ $5.32343 \cdot 10^{-5}$
0	0	2	$2P_{3/2}$	3.401441545267867910	3.4014365137 Δ $5.032 \cdot 10^{-6}$ δ $1.479 \cdot 10^{-6}$	3.401436514 Δ $5.031 \cdot 10^{-6}$ δ $1.479 \cdot 10^{-6}$	3.4014432223 Δ $1.677 \cdot 10^{-6}$ δ $4.93 \cdot 10^{-7}$
1	1	1	$2S_{1/2}$	3.401486829466143670	3.4013962436 Δ $9.059 \cdot 10^{-5}$ δ $2.663 \cdot 10^{-5}$	3.401396315 Δ $9.051 \cdot 10^{-5}$ δ $2.661 \cdot 10^{-5}$	3.4015773644 Δ $9.054 \cdot 10^{-5}$ δ $2.661 \cdot 10^{-5}$
1	0	–1	$2P_{1/2}$	3.401486829466143670	3.401476766 Δ $1.006 \cdot 10^{-5}$ δ $2.958 \cdot 10^{-6}$	3.401476766 Δ $1.006 \cdot 10^{-5}$ δ $2.958 \cdot 10^{-6}$	3.4014834751 Δ $3.354 \cdot 10^{-6}$ δ $9.86 \cdot 10^{-7}$
0	0	3	$3D_{5/2}$	1.511749002642121710	1.5117486448 Δ $3.58 \cdot 10^{-7}$ δ $2.368 \cdot 10^{-7}$	1.5117486449 Δ $3.58 \cdot 10^{-7}$ δ $2.368 \cdot 10^{-7}$	1.5117490742 Δ $7.2 \cdot 10^{-8}$ δ $4.76 \cdot 10^{-8}$
1	0	–2	$3D_{3/2}$	1.511753475048026430	1.5117529384 Δ $5.37 \cdot 10^{-7}$ δ $3.552 \cdot 10^{-7}$	1.5117529384 Δ $5.37 \cdot 10^{-7}$ δ $3.552 \cdot 10^{-7}$	1.5117533677 Δ $1.08 \cdot 10^{-7}$ δ $7.144 \cdot 10^{-8}$
1	1	2	$3P_{3/2}$	1.511753475048026430	1.5117519842 Δ $1.491 \cdot 10^{-6}$ δ $9.86 \cdot 10^{-7}$	1.5117519843 Δ $1.491 \cdot 10^{-6}$ δ $9.86 \cdot 10^{-7}$	1.511753972 Δ $4.97 \cdot 10^{-7}$ δ $3.288 \cdot 10^{-7}$
2	1	–1	$3P_{1/2}$	1.511766892603198600	1.5117639108 Δ $2.982 \cdot 10^{-6}$ δ $1.973 \cdot 10^{-6}$	1.5117639109 Δ $2.982 \cdot 10^{-6}$ δ $1.973 \cdot 10^{-6}$	1.5117658987 Δ $9.94 \cdot 10^{-7}$ δ $6.575 \cdot 10^{-7}$
2	2	1	$3S_{1/2}$	1.511766892603198600	1.5117400522 Δ $2.684 \cdot 10^{-5}$ δ $1.775 \cdot 10^{-5}$	1.5117400735 Δ $2.682 \cdot 10^{-5}$ δ $1.774 \cdot 10^{-5}$	1.5117937174 Δ $2.683 \cdot 10^{-5}$ δ $1.774 \cdot 10^{-5}$

Δ ist die absolute und δ die relative Abweichung zum exakten Sommerfeld–Wert.

7.5 Diskussion der numerischen Ergebnisse

Die berechneten Energiewerte, sowie die Funktionsgraphen $a(x)$ führen zwingend zu dem Schluß, daß ein Whittaker–WKB–Verfahren den globalen WKB–Verfahren aus programmiertechnischen und aus Genauigkeitsgründen vorzuziehen ist. Die Funktionsgraphen von $a(x)$ für globale WKB–Verfahren weisen außerhalb des Integrationsgebietes Plateaus auf, welche die Struktur der entsprechenden Radialgleichung enthalten. Da diese außerhalb des Integrationsgebietes liegen, berücksichtigt ein WKB–Verfahren diese Informationen nicht. Beim Whittaker–WKB–Verfahren ist die wesentliche Struktur von $a(x)$ im Integrationsgebiet enthalten. WKB–Rechnungen zum Potential des ausgedehneten Kerns liefern lediglich die Coulomb–Ergebnisse, da die Potentialabänderung am Kernort außerhalb des klassisch erlaubten Bereichs liegt. Da die exakten Lösungen durch einen ausgedehnten Kern nur geringfügig von den Coulomb–Ergebnissen abweichen, liefern WKB–Rechnungen trotzdem gute Ergebnisse.

Selbstredend sind die WKB–Ergebnisse nicht sensitiv auf Variation des Kernradius. Für kleine globale Abänderungen des Coulomb–Potentials – z.B. Abschirmung – sind WKB–Verfahren sehr wohl sensitiv auf die Änderung.

Anhang A

Konstanten

In meine numerischen Rechnungen gehen mehrere Naturkonstanten ein. Als Einheitensystem habe ich das **cgs System** verwendet, in welchem die Konstanten folgende Werte annehmen.

$$
\begin{aligned}
h &= 6.626 \cdot 10^{-27} \mathrm{erg\ s} = \text{Plancksches Wirkungsquantum} \\
\hbar &= \frac{h}{2\pi} = 1.0546 \cdot 10^{-27} \mathrm{erg\ s} \\
c &= 2.997925 \cdot 10^{10} \frac{\mathrm{cm}}{\mathrm{s}} = \text{Vakuum Lichtgeschwindigkeit} \\
\alpha &= \frac{e_0^2}{\hbar c} = \frac{1}{137.036} = \text{Sommerfeldsche Feinstrukur Konstante} \\
m_e &= 9.1096 \cdot 10^{-28} \mathrm{g} = \text{Elektronenruheenergie} \\
m_e c^2 &= 0.511 \mathrm{MeV} \\
\lambda\!\!\!^{-} &= \frac{\hbar}{m_e c} = 3.8616 \cdot 10^{-11} \mathrm{cm} \\
e_0 &= 4.80324 \cdot 10^{-10} \mathrm{esu} = \text{Elementarladung}
\end{aligned}
$$

Anhang B

Normalform Transformation

Eine Differentialgleichung der Form

$$\partial_r^2 \eta + \beta(r)\partial_r \eta + \alpha(r)\eta = 0 \tag{B.1}$$

soll auf Normalform gebracht werden. Eine Differentialgleichung obiger Form ist in Normalform wenn der Term 1. Ornung verschwindet, d.h. $\beta \equiv 0$.

Mit einem Produktansatz der Lösungsfunktion η läßt sich Normalform erreichen.

$$\eta(r) = f(r)g(r) \tag{B.2}$$

$$\Rightarrow \partial_r \eta = f'g + fg' \tag{B.3}$$

$$\Rightarrow \partial_r^2 \eta = f''g + 2f'g' + fg'' \tag{B.4}$$

$$\Rightarrow f''g + 2f'g' + fg'' + \beta(f'g + fg')\alpha fg = 0 \tag{B.5}$$

Division durch f liefert

$$g'' + g'\left(2\frac{f'}{f} + \beta\right) + \left(\frac{f''}{f} + \beta\frac{f'}{f} + \alpha\right) g = 0 \tag{B.6}$$

Falls f Nullstellen hat, muß die Lösung bzw. deren stetige Fortsetzung an der Originalgleichung auf Richtigkeit geprüft werden.

Diese Differentialgleichung für g hat die Normalform

$$g'' + \left(\frac{f''}{f} + \beta\frac{f'}{f} + \alpha\right) g = 0 \tag{B.7}$$

falls gilt

$$2\frac{f'}{f} + \beta = 0 \tag{B.8}$$

$$\Longleftrightarrow \frac{2df}{f} = -\beta dr \tag{B.9}$$

$$\Longleftrightarrow 2\int^{f} \frac{df}{f} = -\int^{r} \beta \ dr + C'' \tag{B.10}$$

$$\Longleftrightarrow 2\ln f = -\int^{r} \beta \ dr + C'' \tag{B.11}$$

$$\Longleftrightarrow \ln f = -\frac{1}{2}\int^{r} \beta \ dr + C' \tag{B.12}$$

$$\Longleftrightarrow f = C\exp\left\{-\frac{1}{2}\int^{r} \beta \ dr\right\} \tag{B.13}$$

Man kann also obige Differentialgleichung auf Normalform bringen, falls $\beta(r)$ geschlossen integrierbar ist.

Anhang C

Berechnung von WKB–Integralen mittels Funktionentheorie nach Heinz Krüger

C.1 Allgemeine Aussagen

WKB–Integrale für Probleme mit zwei Umkehrpunkten führen zu Integralen der Formen

$$I_1 = \int_{-1}^{1} dz\ R(z)\sqrt{1-z^2} \tag{C.1}$$

$$I_2 = \int_{-1}^{1} dz\ \frac{R(z)}{\sqrt{1-z^2}} \tag{C.2}$$

Dabei hat $R(z)$ im allgemeinen die Eigenschaften

$$R(z) = \begin{cases} \text{holomorph} & -1 \leq z \leq 1 \\ \text{meromorph} & \text{sonst} \end{cases} \tag{C.3}$$

Die Integralgrenzen von I_1 und I_2 können mittels Euler-Abbildung auf ganz $\mathbb{R}$ ausgedehnt werden:

$$w = \frac{\sqrt{1-z^2}}{1-z} \Rightarrow w^2 = \frac{1+z}{1-z} \Rightarrow z = \frac{w^2-1}{w^2+1} \tag{C.4}$$

Weiter ergibt sich

$$\sqrt{1-z^2} = w(1-z) = \frac{2w}{w^2+1} \tag{C.5}$$

Für diese Abbildung transformieren sich die Differentialformen gemäß

$$dz = dw\frac{4w}{(w^2+1)^2} \tag{C.6}$$

und die Integralgrenzen werden zu

$$w(z=-1) \;=\; 0 \tag{C.7}$$

$$w(Z=1) \;=\; \lim_{\epsilon\to 0} w(1-\epsilon) = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{\sqrt{\epsilon(2-\epsilon)}}{\epsilon} = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{\sqrt{2-\epsilon}}{\sqrt{\epsilon}} = \infty \tag{C.8}$$

Somit transformieren sich die Integrale zu

$$I_1 \;=\; \int_0^\infty \frac{dw\;4w}{(1+w^2)^2} R\left(\frac{w^2-1}{w^2+1}\right)\frac{2w}{w^2+1} = \int_0^\infty \frac{dw\;8w^2}{(w^2+1)^3} R\left(\frac{w^2-1}{w^2+1}\right) \tag{C.9}$$

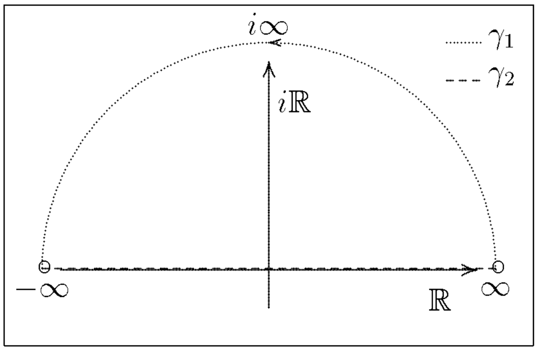
$$I_2 \;=\; \int_0^\infty \frac{dw\;4w}{(w^2+1)^2} R\left(\frac{w^2-1}{w^2+1}\right)\frac{w^2+1}{2w} = \int_0^\infty \frac{2\;dw}{w^2+1} R\left(\frac{w^2-1}{w^2+1}\right) \tag{C.10}$$

Da jeweils die Integranden Funktionen in w^2 – also gerade – sind, kann das Integral symmetrisch erweitert werden.

$$I_1 \;=\; \int_{-\infty}^\infty \frac{dw\;4w^2}{(w^2+1)^3} R\left(\frac{w^2-1}{w^2+1}\right) \tag{C.11}$$

$$I_2 \;=\; \int_{-\infty}^\infty \frac{dw}{w^2+1} R\left(\frac{w^2-1}{w^2+1}\right) \tag{C.12}$$

Interpretiert man den Integralweg, unter Berücksichtigung der Einbettung von $\mathbb{R}$ in $\mathbb{C}$, als Teil eines Weges in der Gauss–Ebene (vergl. Bild) so läßt sich der Residuensatz zur Berechnung der Integrale heranziehen.



Die meromorphe Funktion R ist auf dem Intervall $[-1,1]$ beschränkt, da sie dort holomorph ist. Der Vorfaktor ist auf γ_1 Null wegen

$$\frac{w^2}{(w^2+1)^3}\Big|_{\gamma_1} = \lim_{\varrho\to\infty}\frac{\varrho^2 e^{2i\varphi}}{(\varrho^2 e^{2i\varphi}+1)^3} = \lim_{\varrho\to\infty}\frac{e^{2i\varphi}}{\varrho^4(e^{2i\varphi}+\varrho^{-2})^3} = \lim_{\varrho\to\infty}\varrho^{-4} = 0 \tag{C.13}$$

$$\frac{1}{w^2+1}\Big|_{\gamma_1} = \lim_{\varrho\to\infty}\frac{1}{\varrho^2 e^{2i\varphi}+1} = \lim_{\varrho\to\infty}\frac{1}{\varrho^2}\lim_{\varrho\to\infty}\frac{1}{e^{2i\varphi}+\varrho^{-2}} = 0 \tag{C.14}$$

Folglich ist das geschlossene Kurvenintegral über $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$ gleich dem Integral über die reelle Achse:

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw\ 4w^2}{(w^2+1)^3} R\left(\frac{w^2-1}{w^2+1}\right) = \oint_{\gamma} \frac{dw\ 4w^2}{(w^2+1)^3} R\left(\frac{w^2-1}{w^2+1}\right) \tag{C.15}$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw}{w^2+1} R\left(\frac{w^2-1}{w^2+1}\right) = \oint_{\gamma} \frac{dw}{w^2+1} R\left(\frac{w^2-1}{w^2+1}\right) \tag{C.16}$$

Unter Anwendung des Residuensatzes erhält man nun

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{-1}^{1} dz\ R(z)\sqrt{1-z^2} \\ &= 8\pi i \sum_k \mathrm{Res}_{w_k|\mathrm{Im}(w_k)>0} \left\{ \frac{w^2}{(w^2+1)^3} R\left(\frac{w^2-1}{w^2+1}\right) \right\} \end{aligned} \tag{C.17}$$

$$I_2 = \int_{-1}^{1} dz\ \frac{R(z)}{\sqrt{1-z^2}} = 2\pi i \sum_k \mathrm{Res}_{w_k|\mathrm{Im}(w_k)>0} \left\{ \frac{1}{w^2+1} R\left(\frac{w^2-1}{w^2+1}\right) \right\} \tag{C.18}$$

Die Summe über die Residuen kann zerlegt werden in ein Residuum, das von einem Pol in der oberen Halbebene des jeweiligen Vorfaktors kommt und eine Summe von Residuen von Polen der Funktion R.

Für beide Vorfaktoren ist der Pol in der oberen Halbebene $w_k = +i$.

$$\mathrm{Res}_{w=i} \left\{ \frac{8w^2}{(w^2+1)^3} R\left(\frac{w^2-1}{w^2+1}\right) \right\} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_0(i)} \frac{dw\ 8w^2}{(w^2+1)^3} R\left(\frac{w^2-1}{w^2+1}\right) \tag{C.19}$$

wobei $C_0(i)$ ein nullhomologer Zyklus um $w = +i$ ist. Nach der Koordinatentransformation auf z erhält man

$$\mathrm{Res}_{w=i} \left\{ \frac{8w^2}{(w^2+1)^3} R\left(\frac{w^2-1}{w^2+1}\right) \right\} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_0(\infty)} dz\ \sqrt{1-z^2} R(z) \tag{C.20}$$

Mit einer weiterenTransformation $t = z^{-1}$ und den entsprechenden Umrechnungen liegt die gewünschte Integralformel vor.

$$dz = -\frac{1}{t^2} dt \tag{C.21}$$

$$\begin{aligned} \sqrt{1-z^2} &= \sqrt{1-\frac{1}{t^2}} = \left|\frac{1}{t}\right| \sqrt{t^2-1} = \mathrm{sgn}(t)\frac{1}{t}\sqrt{t^2-1} \\ &= \mathrm{sgn}(t)\mathrm{sgn}(i)\frac{i}{t}\sqrt{1-t^2} \end{aligned} \tag{C.22}$$

$$\begin{aligned} \mathrm{Im}(w) &= \mathrm{Im}\left(\frac{\sqrt{1-t^{-2}}}{1-t^{-1}}\right) = \mathrm{Im}\left(\frac{|t^{-1}|\sqrt{t^2-1}}{\mathrm{sgn}(t)\,|t^{-1}|\,(t-1)}\right) \\ &= \mathrm{Im}\left(\frac{\mathrm{sgn}(i) i \sqrt{1-t^2}}{\mathrm{sgn}(t)(t-1)}\right) \end{aligned} \tag{C.23}$$

$$= -\mathrm{sgn}(i)\mathrm{sgn}(t)\frac{\sqrt{1-t^2}}{1-t} \overset{!}{>} 0|_{t=0} \tag{C.24}$$

$$\Rightarrow \operatorname{sgn}(i)\operatorname{sgn}(t) \overset{!}{=} -1 \tag{C.25}$$

$$\Rightarrow \sqrt{1-t^{-2}} = -\frac{i}{t}\sqrt{1-t^2} \tag{C.26}$$

$$\mathrm{Res}_{w=i}\left\{\frac{8w^2}{(w^2+1)^3}R\left(\frac{w^2-1}{w^2+1}\right)\right\} = i\mathrm{Res}_{w=0}\left\{\frac{\sqrt{1-t^2}}{t^3}R(t^{-1})\right\} \tag{C.27}$$

$$\boxed{\begin{aligned} I_1 &= \pi i \sum_k \mathrm{Res}_{z_k}\left\{R(z)\sqrt{1-z^2}\,\middle|\,\mathrm{Im}\left(\frac{\sqrt{1-z_k^2}}{1-z_k}\right) > 0\right\} \\ &- \pi \mathrm{Res}_{t=0}\left\{\frac{\sqrt{1-t^2}}{t^3}R(t^{-1})\right\} \end{aligned}} \tag{C.28}$$

Nach dem zu Beginn gezeigten Transformationsverhalten $z \longleftrightarrow w$ gilt

$$\mathrm{Res}_{w=i}\left\{\frac{2}{w^2+1}R\left(\frac{w^2-1}{w^2+1}\right)\right\} = \mathrm{Res}_{z=\infty}\left\{\frac{R(z)}{\sqrt{1-z^2}}\right\} \tag{C.29}$$

Ferner erhält man nach Transformation auf $t = z^{-1}$ wegen

$$\sqrt{1-z^2} = \sqrt{1-t^{-2}} = -\frac{i}{t}\sqrt{1-t^2} \tag{C.30}$$

für das Residuum des Vorfaktors

$$\mathrm{Res}_{z=\infty}\left\{\frac{R(z)}{\sqrt{1-z^2}}\right\} = \mathrm{Res}_{t=0}\left\{\frac{R\left(\frac{1}{t}\right)\frac{1}{t^2}}{\frac{i}{t}\sqrt{1-t^2}}\right\} = -i\mathrm{Res}_{t=0}\left\{\frac{R(t^{-1})}{t\sqrt{1-t^2}}\right\} \tag{C.31}$$

Somit kann das zweite Integral mit folgender Formel berechnet werden

$$\boxed{\begin{aligned} I_2 &= \pi i \sum_k \mathrm{Res}_{z_k}\left\{\frac{R(z)}{\sqrt{1-z^2}}\,\middle|\,\mathrm{Im}\left(\frac{\sqrt{1-z_k^2}}{1-z_k}\right) > 0\right\} \\ &+ \pi \mathrm{Res}_{t=0}\left\{\frac{R(t^{-1})}{t\sqrt{1-t^2}}\right\} \end{aligned}} \tag{C.32}$$

C.2 Spezielles Integral

Bei der analytischen Berechnung von WKB–Integralen treten oft Integrale vom Typ

$$\int_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{r}\,\sqrt{ar^2+br+c} \tag{C.33}$$

auf, wobei die Funktion unter der Wurzel zwei Nullstellen r_1 und r_2 haben soll.

$$Q(r) \equiv ar^2 + br + c \tag{C.34}$$

Unter den oben genannten Voraussetzungen kann die quadratische Funktion $Q(r)$ geschrieben werden als

$$Q(r) = K(r - r_1)(r - r_2) = K(r^2 - r(r_1 + r_2) + r_1 r_2) \tag{C.35}$$

Die Nullstellen sind gegeben durch

$$r_{1,2} = -\frac{b}{2a} \pm \frac{\sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \tag{C.36}$$

das Extremum liegt bei r_E

$$r_E = -\frac{b}{2a} = \frac{r_1 + r_2}{2} \tag{C.37}$$

Der Funktionswert im Extremum kann durch a, b und c oder durch K, r_1 und r_2 ausgedrückt werden, wodurch eine Variable eliminiert werden kann.

$$Q(r_E) = -\frac{b^2}{4a} + c = -\frac{K}{4}(r_2 - r_1)^2 \tag{C.38}$$

Die Normierungskonstante K für $Q(r)$ kann damit berechnet werden

$$K = \frac{b^2/a - 4c}{(r_2 - r_1)^2} \tag{C.39}$$

Nach Ausführen der linearen Koordinatentransformation $r \leftrightarrow z$

$$r = \frac{z+1}{2}(r_2 - r_1) + r_1 = z\left(\frac{r_2 - r_1}{2}\right) + \frac{r_1 + r_2}{2} \tag{C.40}$$

$$z = 2\frac{r - r_1}{r_2 - r_1} - 1 \qquad dr = \frac{r_2 - r_1}{2}dz \tag{C.41}$$

$$\begin{aligned} r_1 &\leftrightarrow -1 \\ r_2 &\leftrightarrow 1 \end{aligned} \tag{C.42}$$

$$(r - r_1)(r_2 - r) = \left(\frac{r_2 - r_1}{2}\right)^2 (1 - z^2) \tag{C.43}$$

$$\begin{aligned}
\int\limits_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{r}\ \sqrt{ar^2+br+c} &= \int\limits_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{r}\ \sqrt{-K\left(\frac{r_2-r_1}{2}\right)^2(1-z^2)} \\
&= \sqrt{-K}\frac{r_2-r_1}{2}\int\limits_{r_1}^{r_2}\frac{dr}{r}\ \sqrt{1-z^2} \\
&= \sqrt{-K}\left(\frac{r_2-r_1}{2}\right)^2\int\limits_{-1}^{1}\frac{dz}{r(z)}\ \sqrt{1-z^2} \qquad \text{(C.44)}
\end{aligned}$$

Führt man noch die Konstante z_0 ein

$$r(z) = \frac{r_2-r_1}{2}\left[z+\frac{r_2+r_1}{r_2-r_1}\right] = \frac{r_2-r_1}{2}(z-z_0) \qquad z_0 = -\frac{r_2+r_1}{r_2-r_1} \qquad \text{(C.45)}$$

so kann das Integral weiter berechnet werden

$$\begin{aligned}
\int\limits_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{r}\ \sqrt{ar^2+br+c} &= \sqrt{-K}\frac{r_2-r_1}{2}\int\limits_{-1}^{1}\frac{dz}{z-z_0}\ \sqrt{1-z^2} \\
&= \sqrt{-K}\frac{r_2-r_1}{2}\left[\pi i\ \mathrm{Res}_{z_0}\left\{\frac{\sqrt{1-z^2}}{z-z_0}\right\}\Bigg|_{\mathrm{Im}\sqrt{1-z^2}>0}\right. \\
&- \left.\pi\mathrm{Res}_{z=0}\left\{\frac{\sqrt{1-z^2}}{z^3}\frac{1}{\frac{1}{z}-z_0}\right\}\right] \qquad \text{(C.46)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathrm{Res}_{z=0}\left\{\frac{\sqrt{1-z^2}}{z^3}\frac{1}{z^{-1}-z_0}\right\} &= \mathrm{Res}_{z=0}\left\{\frac{\sqrt{1-z^2}}{z^2}\frac{1}{1-zz_0}\right\} \\
&= \lim_{z\to 0}\left(\frac{\sqrt{1-z^2}}{1-zz_0}\right)' \qquad \text{(C.47)} \\
&= \lim_{z\to 0}\frac{\frac{-2z(1-zz_0)}{2\sqrt{1-z^2}}-\sqrt{1-z^2}(-z_0)}{(1-zz_0)^2} \\
&= z_0
\end{aligned}$$

Mit diesem Ergebnis kann das Integral auf folgenden einfachen Ausdruck gebracht werden.

$$\begin{aligned}
\int\limits_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{r}\ \sqrt{ar^2+br+c} &= \sqrt{-K}\frac{r_2-r_1}{2}\left[\pi i\sqrt{1-z_0^2}-\pi z_0\right] \\
&= \sqrt{-K}\frac{r_2-r_1}{2}\left[\frac{-2\pi}{r_2-r_1}\sqrt{r_1r_2}-\pi z_0\right] \\
&= \pi\sqrt{-K}\left[\frac{r_2+r_1}{2}-\sqrt{r_1r_2}\right] \qquad \text{(C.48)}
\end{aligned}$$

Drückt man r_1 und r_2 wieder durch a, b und c aus, so müssen die Terme

$$\frac{r_2+r_1}{2} = -\frac{b}{2a} \qquad \text{(C.49)}$$

$$r_1 r_2 = \frac{c}{a} \tag{C.50}$$

$$K = \frac{b^2/a - 4c}{(r_2 - r_1)^2} \tag{C.51}$$

eingesetzt werden, was zu folgendem Ergebnis führt:

$$\int\limits_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{r}\ \sqrt{ar^2 + br + c} = \pi \left[\frac{b}{2\sqrt{-a}} - \sqrt{-c} \right] \tag{C.52}$$

Anhang D

Explizite Berechnung der Schwarz–Ableitung

Die Schwarz–Ableitung wurde nur aus der ersten Korrektur eliminiert **(3.2.2)**. Sollen höhere Korrekturen numerisch berechnet werden, so kann die in diesem Kapitel vorgestellte Methode zur Berechnung der Schwarz–Ableitung verwendet werden.

Die Schwarz–Ableitung ist definiert durch

$$< z; x >= -2z'^{1/2}\left(z'^{-1/2}\right)'' = \frac{z'''}{z'} - \frac{3}{2}\left(\frac{z''}{z'}\right)^2 \tag{D.1}$$

Dies bedeutet, daß mit $z(x)$ oder $z'(x)$ auch die Schwarz–Ableitung leicht berechenbar ist. $z(x)$ ist durch die nichtlineare Differentialgleichung

$$z'(x) = \Lambda\sqrt{\frac{a(x,\Lambda^2)}{b_0(z(x))}} \tag{D.2}$$

bestimmt, wobei $b_0(z) = \varepsilon_0 - z^2$. Da die Schwarz–Ableitung nur von Quotienten von Ableitungen von $z(x)$ abhängt, spielt ein konstanter Faktor keine Rolle. Aus diesem Grund soll für die weitere Betrachtung der Faktor Λ unberücksichtigt bleiben.

Die zur Differentialgleichung gehörende Integralbeziehungen erhält man durch Integration der linken Seite von

$$\int_{-\sqrt{\varepsilon_0}}^{z} dz\ \sqrt{|\varepsilon_0 - z^2|} = \int_{x_1}^{x} dx\ \sqrt{|a(x)|} \tag{D.3}$$

für verschiedene Bereiche

$$\frac{z}{2}\sqrt{z^2-\varepsilon_0} + \frac{\varepsilon_0}{2}\mathrm{arccosh}\left(-\frac{z}{\sqrt{\varepsilon_0}}\right) = \int_{x_1}^{x_2} dx\ \sqrt{-a(x)} \quad \text{für} \quad \left\{\begin{array}{l} x \le x_1 \\ z \le -\sqrt{\varepsilon_0}\end{array}\right. \tag{D.4}$$

$$\frac{z}{2}\sqrt{\varepsilon_0 - z^2} + \frac{\varepsilon_0}{2}\left[\frac{\pi}{2} + \arcsin\left(\frac{z}{\sqrt{\varepsilon_0}}\right)\right] = \int_{x_1}^{x_2} dx\, \sqrt{a(x)} \quad \text{für} \quad \begin{cases} x_1 \leq x \leq x_2 \\ -\sqrt{\varepsilon_0} \leq z \leq \sqrt{\varepsilon_0} \end{cases} \tag{D.5}$$

$$\frac{z}{2}\sqrt{z^2 - \varepsilon_0} - \frac{\varepsilon_0}{2}\text{arccosh}\left(\frac{z}{\sqrt{\varepsilon_0}}\right) = \int_{x_1}^{x_2} dx\, \sqrt{-a(x)} \quad \text{für} \quad \begin{cases} x_2 \leq x \\ \sqrt{\varepsilon_0} \leq z \end{cases} \tag{D.6}$$

Folgt man [11] und entwickelt $z(x)$ in eine Potenzreihe, indem man die Funktionswerte und Ableitungen an den klassischen Umkehrpunkten vorgibt, so ist eine approximative Berechnung der Schwarz–Ableitung möglich. De facto sollen die Koeffizienten von Funktionswerten und Ableitungen der Funktionen $a(x)$ und $b_0(z)$ abhängen.

Zunächst soll noch eine Hilfsfunktion $\tilde{b}(x) = b_0(z(x))$ eingeführt werden. Damit ist

$$(z')^2 = \frac{a(x)}{\tilde{b}(x)} \tag{D.7}$$

Um Singularitäten der Lösung an den klassischen Umkehrpunkten auszuschließen, die aus der Koordinatentransformation kommen, wird gefordert, daß $a(x)$ und $\tilde{b}(x)$ ihre Nullstellen in gleicher Ordnung an den gleichen Stellen x_i, $(i = 1, 2)$ haben. An den Nullstellen kann zur Berechnung von Ableitungen von $z(x)$ die Regel von de l'Hospital benutzt werden.

$$(z'(x_i))^2 = \frac{a'(x_i)}{\tilde{b}'(x_i)} \tag{D.8}$$

$$\Rightarrow z'(x_i) = \sqrt{\frac{a'(x_i)}{\tilde{b}'(x_i)}} \tag{D.9}$$

Wegen

$$\tilde{b}'(x_i) = \partial_x b_0(z(x_i)) = z'(x_i)\partial_z b_0(z(x_i)) \equiv z'(x_i)\dot{b_0}(z_i) \tag{D.10}$$

mit $z_i = z(x_i)$. Somit gilt

$$z'(x_i) = \sqrt{\frac{a'(x_i)}{z'(x_i)\dot{b_0}(z_i)}} \tag{D.11}$$

$$\boxed{\Rightarrow z'(x_i) = \left(\frac{a'(x_i)}{\dot{b}_0(z_i)}\right)^{1/3}} \tag{D.12}$$

$$z'' = \frac{1}{2\sqrt{\frac{a}{\tilde{b}}}}\left[\frac{a'\tilde{b} - a\tilde{b}'}{\tilde{b}^2}\right] = \frac{1}{2z'}\left[\frac{a'\tilde{b} - a\tilde{b}'}{\tilde{b}^2}\right] \tag{D.13}$$

$$\begin{aligned} z''(x_i) &= \frac{1}{2z'(x_i)}\left[\frac{a''(x_i)\tilde{b}(x_i) + a'(x_i)\tilde{b}'(x_i) - a'(x_i)\tilde{b}'(x_i) - a(x_i)\tilde{b}''(x_i)}{2\tilde{b}(x_i)\tilde{b}'(x_i)}\right] && \text{(D.14)} \\ &= \frac{1}{4z'(x_i)}\left[\frac{a''(x_i)\tilde{b}'(x_i) - a'(x_i)\tilde{b}''(x_i)}{\left(\tilde{b}'(x_i)\right)^2}\right] && \text{(D.15)} \end{aligned}$$

wobei in der zweiten Zeile verschwindende Terme bereits unterdrückt wurden. Klammert man nun noch $z'^2 = a'/\tilde{b}'$ aus, so erhält man

$$z''(x_i) = \frac{z'(x_i)}{4}\left[\frac{a''(x_i)}{a'(x_i)} - \frac{\tilde{b}''(x_i)}{\tilde{b}'(x_i)}\right] \tag{D.16}$$

Mit **(D.10)** und

$$\tilde{b}'' = \partial_x z'\dot{b}_0 = z''\dot{b}_0 + (z')^2\, \ddot{b}_0 \tag{D.17}$$

$$z''(x_i) = \frac{z'(x_i)a''(x_i)}{4a'(x_i)} - z''(x_i)\frac{1}{4} - \frac{z'^2\ddot{b}_0(x_i)}{4\dot{b}_0(x_i)} \tag{D.18}$$

Somit erhält man für die zweite Ableitung von $z(x)$

$$\boxed{z''(x_i) = \frac{z'(x_i)}{5}\left[\frac{a''(x_i)}{a'(x_i)} - z'(x_i)\frac{\ddot{b}_0(x_i)}{\dot{b}_0(x_i)}\right]} \tag{D.19}$$

Wegen

$$z'' = \frac{1}{2z'}\left[\frac{a'\tilde{b} - a\tilde{b}'}{\tilde{b}^2}\right] = \frac{z'}{2}\left[\frac{a'}{a} - \frac{\tilde{b}'}{\tilde{b}}\right] \tag{D.20}$$

ergibt sich die dritte Ableitung zu

$$z''' = \frac{z''^2}{z'} + \frac{z'}{2}\left[\frac{a''a - a'^2}{a^2} - \frac{\tilde{b}''\tilde{b} - \left(\tilde{b}'\right)^2}{\tilde{b}^2}\right] \tag{D.21}$$

An den klassischen Umkehrpunkten gilt

$$z'''(x_i) = \frac{(z''(x_i))^2}{z'(x_i)} + \frac{z'(x_i)}{2}\left[\frac{a'''a + a''a' - 2a'a''}{2aa'} - \frac{\tilde{b}'''\tilde{b} + \tilde{b}''\tilde{b}' - 2\tilde{b}'\tilde{b}''}{2\tilde{b}\tilde{b}'}\right] \tag{D.22}$$

$$\boxed{z'''(x_i) = \frac{(z'')^2}{z'} + \frac{z'}{2}\left[\left(\frac{\tilde{b}''}{\tilde{b}'}\right)^2 - \left(\frac{a''}{a'}\right)^2\right]} \tag{D.23}$$

Wird nun im Sinne einer Approximation ein abbrechender Potenzreihenansatz für $z(x)$ in x gemacht

$$z(x) \approx \zeta(x) = \sum_{k=0}^{2K+1} \zeta_k x^k \tag{D.24}$$

so sind $2K+2$ Bedingungen nötig, um die Koeffizienten des Polynoms zu bestimmen.

$$\begin{array}{lll} \zeta(x_i) = z(x_i) & & 2 \text{ Bedingungen} \\ \zeta^{(k)}(x_i) = z^{(k)}(x_i) & k = 1, \ldots, K & 2K \text{ Bedingungen} \end{array} \tag{D.25}$$

Für K=3 erhält man

$$\zeta' = \sum_{k=1}^{2K+1} \zeta_k k x^{k-1} \tag{D.26}$$

$$\zeta'' = \sum_{k=2}^{2K+1} \zeta_k k(k-1) x^{k-2} \tag{D.27}$$

$$\zeta''' = \sum_{k=3}^{2K+1} \zeta_k k(k-1)(k-2) x^{k-3} \tag{D.28}$$

Die Koeffizienten ζ_k sind durch folgendes lineares Gleichungssystem bestimmt.

$$\begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 & x_1^4 & x_1^5 & x_1^6 & x_1^7 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 & x_2^4 & x_2^5 & x_2^6 & x_2^7 \\ 0 & 1 & 2x_1 & 3x_1^2 & 4x_1^3 & 5x_1^4 & 6x_1^5 & 7x_1^6 \\ 0 & 1 & 2x_2 & 3x_2^2 & 4x_2^3 & 5x_2^4 & 6x_2^5 & 7x_2^6 \\ 0 & 0 & 2 & 6x_1 & 12x_1^2 & 20x_1^3 & 30x_1^4 & 42x_1^5 \\ 0 & 0 & 2 & 6x_2 & 12x_2^2 & 20x_2^3 & 30x_2^4 & 42x_2^5 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 24x_1 & 60x_1^2 & 120x_1^3 & 210x_1^4 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 24x_2 & 60x_2^2 & 120x_2^3 & 210x_2^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \\ \zeta_4 \\ \zeta_5 \\ \zeta_6 \\ \zeta_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z(x_1) \\ z(x_2) \\ z'(x_1) \\ z'(x_2) \\ z''(x_1) \\ z''(x_2) \\ z'''(x_1) \\ z'''(x_2) \end{pmatrix} \tag{D.29}$$

Man erkennt, daß die Potenzen der Nullstellen nur in den ersten beiden Zeilen berechnet werden müssen. In den folgenden Zeilen kann man dann auf die beiden ersten zurückgreifen. Numerisch kann das Gleichungssystem mit einem Gauss–Verfahren gelöst werden. Zur Auswertung des Polynoms $\zeta(x)$ bei bekannten ζ_k ist es sinnvoll die übliche Potenzschreibweise umzuformen:

$$\zeta(x) = \zeta_0 + x\left(\zeta_1 + x\left(\zeta_2 + x\left(\zeta_3 + \cdots\right)\right)\right) \tag{D.30}$$

Sei ζ vom Grad G so gilt folgende Iteration

$$h_0 = \zeta_G \tag{D.31}$$

$$h_1 = h_0 x + \zeta_{G-1} \tag{D.32}$$

$$\vdots \tag{D.33}$$

$$h_i = h_{i-1} x + \zeta_{G-i} \tag{D.34}$$

$$\vdots \tag{D.35}$$

$$\zeta(x) = h_G = h_{G-1} x + \zeta_0 \tag{D.36}$$

Somit liegt eine polynomiale Approximation von $z(x)$ vor, aus der problemlos die Schwarz–Ableitung berechnet werden kann.

Anhang E

Orthogonale Polynome

Orthogonale Polynome spielen in vielen Gebieten der Physik eine wichtige Rolle. Hier werden zum Beispiel die Hermite–Polynome zur Darstellung der Lösungen des harmonischen Oszillator Problems benutzt und die Chebyshev–Polynome erster und zweiter Art liefern die Stützstellen bei der numerischen Integration.

E.1 Gegenbauer–Polynome

Die Gegenbauer–Polynome $C_l^{(\alpha)}(x)$ werden oft auch hypersphärische Polynome genannt. Sie werden erzeugt durch [13] Seite 23

$$(1 - 2xz + z^2)^{-\alpha} = \sum_{l=0}^{\infty} z^l C_l^{(\alpha)}(x) \qquad |z| < 1, \quad \alpha \neq 0 \tag{E.1}$$

mit folgenden Zusatzdefinitionen

$$C_{-1}^{(\alpha)}(x) = 0, \qquad C_0^{(\alpha)}(x) = 1 \quad \forall \alpha \in \mathbb{R} \tag{E.2}$$

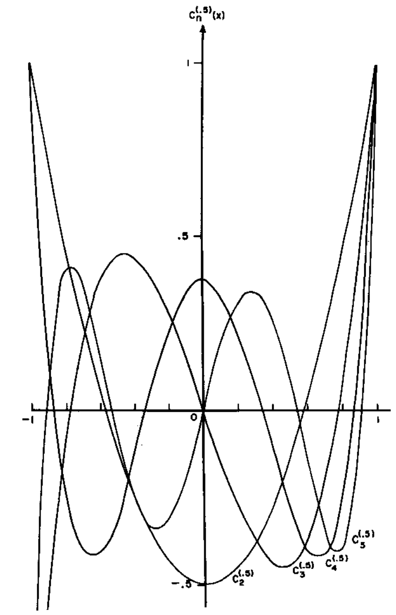
Man kann folgende Rekursionsbeziehung ableiten

$$(l+1)C_{l+1}^{(\alpha)}(x) = x(2l + 2\alpha)C_l^{(\alpha)}(x) - (2\alpha + l - 1)C_{l-1}^{(\alpha)}(x) \tag{E.3}$$

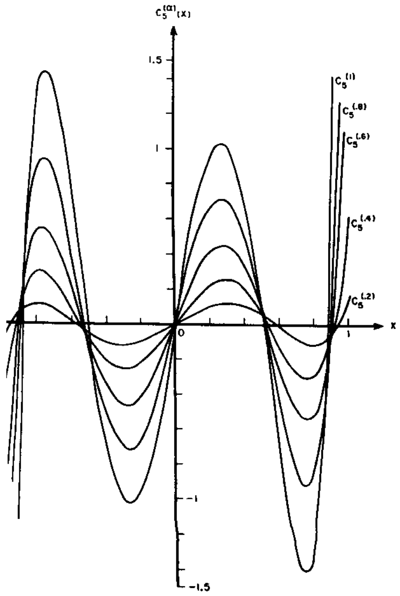
Eigenschaften:

$$C_l^{(\alpha)}(-x) = (-1)^l C_l^{(\alpha)}(x) \qquad \partial_x C_l^{(\alpha)}(x) = 2\alpha C_{l-1}^{(\alpha+1)}(x) \tag{E.4}$$

Die Graphen zu den Gegenbauer–Polynomen mit $\alpha = 0.5$ und $l = 2 \ldots 5$ haben folgendes Aussehen



Hält man hingegen $l = 5$ fest und variiert $\alpha = 0.2 \ldots 1$ so entsteht folgendes Bild

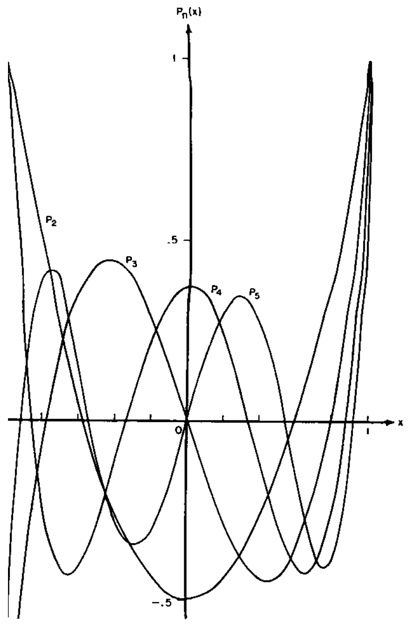


E.2 Legendre–Polynome

Die Legendre–Polynome $P_l(x)$ sind ein Spezialfall der Gegenbauer–Polynome. Es gilt folgender Zusammenhang

$$C_l^{(1/2)}(x) = P_l(x) \tag{E.5}$$

Die Legendre–Polynome für $l = 2 \ldots 5$ haben folgende Form



E.3 Chebyshev–Polynome

Die Chebyshev–Polynome erster und zweiter Art $T_l(x)$, $U_l(x)$ lassen sich ebenfalls mittels der Gegenbauer–Polynome ausdrücken

$$T_l(x) = \frac{l}{2} C_l^{(0)}(x) \quad \forall l \geq 1 \tag{E.6}$$

$$U_l(x) = C_l^{(1)}(x) \tag{E.7}$$

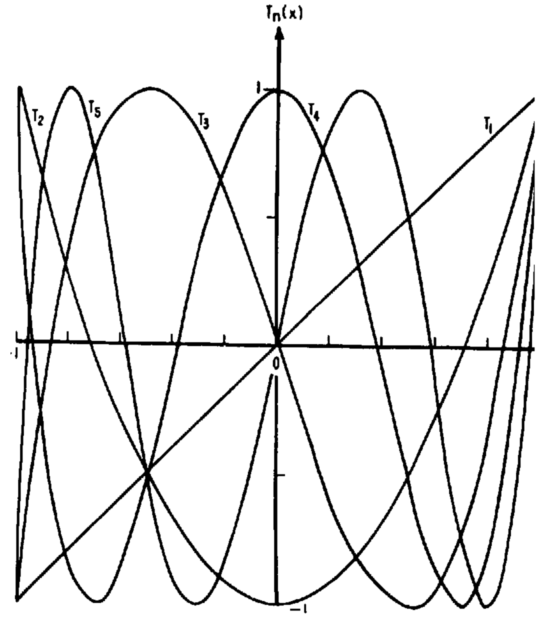
Eigenschaften:

$$T_l(\cos\vartheta) = \cos(l\vartheta) \qquad U_l(\cos\vartheta) = \frac{\sin((l+1)\vartheta)}{\sin\vartheta} \tag{E.8}$$

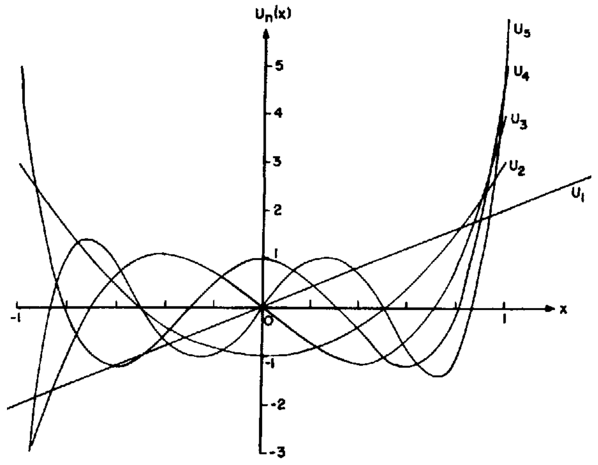
$$T_l(x_k) = 0 \Rightarrow x_k = \cos\left(\frac{\pi(2k-1)}{2l}\right) \tag{E.9}$$

$$U_l(x_k) = 0 \Rightarrow x_k = \cos\left(\frac{k\pi}{l+1}\right) \tag{E.10}$$

Graphen:



Chebyshev–Polynome erster Art $l = 1 \ldots 5$



Chebyshev–Polynome zweiter Art $l = 1 \ldots 5$

E.4 Hermite–Polynome

Die Hermite–Polynome $H_n(x)$ werden erzeugt durch

$$e^{-t^2+2tx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} t^n H_n(x) \tag{E.11}$$

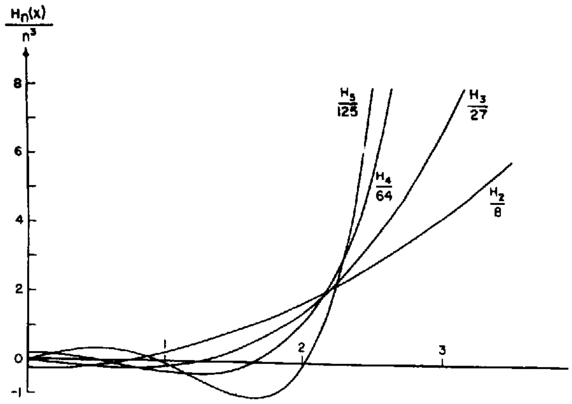
Eine übliche Darstellung der Hermite–Polynome lautet

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \partial_x^n e^{-x^2} \tag{E.12}$$

Die ersten fünf Hermite–Polynome lauten explizit

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1 \\ H_1(x) &= 2x \\ H_2(x) &= 4x^2 - 2 \\ H_3(x) &= 8x^3 - 12x \\ H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12 \\ H_5(x) &= 32x^5 - 160x^3 + 120x \end{aligned} \tag{E.13}$$

Die ersten interessanten Hermite–Polynome haben folgende Graphen



Hermite–Polynome $\frac{H_n(x)}{n^3}$ $n = 2 \ldots 5$

Literaturverzeichnis

[1] M. Abramowitz and I. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions.* Dover Publications, 1970.

[2] L. Bertocchi, S. Fubini, and G. Furlan. The short-wavelength approximation to the Schrödinger equation. *Nuovo Cimento*, 35:599–632, 1965.

[3] L. Brillouin. *C. R. Acad. Sci. or Compt. Rendu.*, 183:24 ff, 1926.

[4] A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, and F. G. Tricomi. *Higher transcendental functions*, volume I. McGraw Hill Book Company, 1953.

[5] W. Fischer and I: Lieb. *Funktionentheorie.* F. Vieweg & Sohn, 1988.

[6] O. Forster. *Analysis 2.* F. Vieweg & Sohn, 1984.

[7] D. Hestenes. Observables, operators, and complex numbers in the Dirac theory. *J. Math. Phys.*, 16:556–572, 1975.

[8] D. Hestenes and A. Weingartshofer, editors. *The Electron*, chapter New solutions of the Dirac equation, pages 49–81. Kulwer Academic Publishers, 1991.

[9] H. Jeffreys. On certain solutions of Mathieu's equation. *Proc. Math. Soc. London*, 23:428–436, 1923.

[10] R. H. Good Jr. The generalization of the WKB method to radial wave equation. *Phys. Rev.*, 90:131–137, 1953.

[11] S. C. Miller Jr. and R. H. Good Jr. A WKB-type approximation to the Schrödinger equation. *Phys. Rev.*, 91:174–179, 1953.

[12] H. A. Kramers. Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung. *Z. Physik*, 39:828–840, 1926.

[13] H. Krüger. Elektrodynamik I Vorlesung, SS 1988.

[14] H. Krüger. Quantenmechanik I Vorlesung, WS 1989/1990.

[15] R. E. Langer. On the connection formulas and the solutions of the wave equation. *Phys. Rev.*, 51:669–676, 1937.

[16] Rudolf E. Langer. The asymptotic solutions of ordinary linear differential equations of the second order, with special reference to a turning point. *Trans. Amer. Math. Soc.*, **67**:461–490, 1949.

[17] Magnus, Oberhettinger, and Soni. *Formulas and Theorems for the special functions of Mathematical Physics*, chapter 7 Whittaker functions, pages 295–323. Springer, 1966.

[18] H. R. Schwarz. *Numerische Mathematik*. B. G. Teubner Stuttgart, 1986.

[19] G. Wentzel. Eine Verallgemeinerung der Quantenbedingungen für die Zwecke der Wellenmechanik. *Z. Physik*, 38:518–529, 1926.

[20] J. Wimp. On the computation of Tricomi's Psi function. *J. Computing*, 13:195–203, 1974.

Danksagung

Für die Betreuung und Unterstützung bei meiner interessanten Arbeit bedanke ich mich herzlichst bei Prof. Dr. Heinz Krüger.

Bei allen, die mich bei der Erstellung meiner Arbeit unterstützt haben, möchte ich mich an dieser Stelle ebenso bedanken.

Insbesondere danke ich Manfred Stein, für die zahlreichen anregenden Fachdiskussionen und Harald Frankenberger für seine bereitwillige mathematische Unterstützung.

Desweiteren konnte ich mich auf den kameradschaftlichen Rat von Frank Peter Pesl, Dr. Klaus Kirsten, Hartmut Hensel und Michael Bootz verlassen.

Nicht unerwähnt bleiben dürfen meine Eltern, die mir mein Studium ermöglichten.