



# Quasi-exakt lösbare polynomiale Potenziale

Quasi-exactly solvable polynomial potentials

**Bachelorarbeit**

vorgelegt von

**Jona Dreier**

ausgegeben und betreut durch

**Prof. Dr. Gernot Münster**

-September 2012-

Institut für Theoretische Physik

WESTFÄLISCHE WILHELMS-UNIVERSITÄT-MÜNSTER

Diese Fassung der Arbeit unterscheidet sich nur geringfügig von der am 12. September 2012 dem Prüfungsamt vorgelegten Version.

1. Gutachter: Prof. Dr. G. Münster
2. Gutachter: PD. Dr. J. Heitger

# Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung . . . . .	1
2	Eigenlösungen quasi-exakt lösbarer Potenziale . . . . .	3
	2.1 Schrödingergleichung in einer Dimension . . . . .	3
	2.2 Basisfunktionen polynomialer Potenziale . . . . .	3
3	Sextisches Potenzial $V_6$ . . . . .	6
	3.1 Basisfunktionen und Lösbarkeitsbedingungen . . . . .	6
	3.2 Schrödingergleichung für ungerade und gerade Eigenfunktionen	10
	3.3 Lösung für niedrige Dimensionen . . . . .	12
	3.4 Gestalt des Potenzials . . . . .	22
4	Quartisches Potenzial $V_4$ . . . . .	29
	4.1 Basisfunktionen und Lösbarkeitsbedingungen . . . . .	30
	4.2 Schrödingergleichung und Eigenfunktionen . . . . .	32
	4.3 Lösung für niedrige Dimensionen . . . . .	33
	4.4 Gestalt des Potenzials . . . . .	39
5	Potenziale höherer Potenzen . . . . .	44
6	Zusammenfassung und Diskussion . . . . .	48
	6.1 Sextisches Potenzial . . . . .	48
	6.2 Quartisches Potenzial . . . . .	48
	6.3 Lösbarkeit und Normierbarkeit für Potenziale höherer Potenzen	49

# Abbildungsverzeichnis

1	$V_6(x)$ aufgetragen gegen $x$ für $A = 1, B = -8, C = 9$ mit beiden zu $n = 2$ bestimmbaren, geraden Eigenfunktionen . . . . .	14
2	$V_6(x)$ aufgetragen gegen $x$ für $A = 1, B = -8, C = 7$ mit beiden zu $n = 3$ bestimmbaren, ungeraden Eigenfunktionen . . . . .	16
3	$V_6(x)$ aufgetragen gegen $x$ für $A = 1, B = -8, C = 5$ mit den drei zu $n = 4$ bestimmbaren, geraden Eigenfunktionen . . . . .	19
4	$V_6(x)$ aufgetragen gegen $x$ für $A = 1, B = -8, C = 3$ mit den drei zu $n = 5$ bestimmbaren, ungeraden Eigenfunktionen . . . . .	22
5	$V_6(x)$ aufgetragen gegen $x$ für $A = 1, C = B^2/(3A) - (2n + 3)$ mit $n = 8$ zu 4 verschiedenen $B \geq 0$ . . . . .	27
6	$V_6(x)$ aufgetragen gegen $x$ für $A = 1, C = B^2/(3A) - (2n + 3)$ mit $n = 2$ zu 3 verschiedenen Werten $B < 0$ . . . . .	28
7	$V_4(x)$ aufgetragen gegen $x$ für $A = 1, B = 4, C = -10, D = -32$ mit beiden zu $n = 3$ bestimmbaren, ungeraden Eigenfunktionen . . . . .	35
8	$V_4(x)$ aufgetragen gegen $x$ für $A = 1, B = 4, C = -10, D = -34$ mit den drei zu $n = 2$ bestimmbaren Eigenfunktionen . . . . .	40
9	$V_4(x)$ aufgetragen gegen $x$ für $A = 1, B = 4, D = C - 5 - n$ mit $n = 5$ zu 4 verschiedenen $C$ . . . . .	42
10	$V_4(x)$ aufgetragen gegen $x$ für $A = 1, C = -2, D = -3 - n - B^2$ mit $n = 2$ zu 4 verschiedenen Werten $B$ . . . . .	43

# Tabellenverzeichnis

1	Anzahl der im sextischen Potenzial auftretenden Mulden in Abhängigkeit der Parameter $B$ und $C$ für $A = 0$ . . . . .	28
2	Anzahl der im sextischen Potenzial auftretenden Mulden in Abhängigkeit der Parameter $B$ und $C$ für $A > 0$ . Der Fall $C \geq B^2/(3A)$ ist nicht mit den Lösbarkeitsbedingungen vereinbar. . . . .	28



# 1 Einleitung

In der nicht-relativistischen Quantenmechanik können Systeme aus einem oder mehreren Teilchen, in denen verschiedenartige, konservative Kräfte wirken, durch den Hamiltonoperator des Gesamtsystems charakterisiert werden. Dieser setzt sich zusammen aus einem Term der kinetischen Energie sowie einem Potenzialterm  $V$ , jeweils bezogen auf alle Teilchen des Systems. Insbesondere beinhaltet der Potenzialterm  $V$  sämtliche Informationen über die im System wirkenden Kräfte. Über die stationäre Schrödingergleichung können dann stationäre Eigenfunktionen des Hamiltonoperators bestimmt werden. Im Allgemeinen resultieren hieraus Eigenzustände mit einem kontinuierlichen Energiespektrum bzw. unendlich vielen, diskreten Eigenenergien, die den Hilbertraum der Eigenlösungen des Hamiltonoperators aufspannen. Über den Zeitentwicklungsoperator lässt sich dann die zeitabhängige Wellenfunktion der Teilchen bestimmen. Für ein Ein-Teilchen-System gibt das Betragsquadrat dieser Wellenfunktionen die räumliche Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchen im entsprechenden Eigenzustand an. Das Lösen der stationären Schrödingergleichung ist also ein elementares Werkzeug, um einerseits die Energieeigenwerte und andererseits die Wellenfunktion eines Systems bestimmen zu können.

In der Physik tritt eine Vielzahl verschiedener Potenzialterme auf und es ist von großem Interesse, die exakten Eigenlösungen zu möglichst vielen Potenzialen zu kennen. Auf analytischem Wege lassen sich diese allerdings nur in sehr wenigen Fällen allgemein und exakt berechnen. Ist dies nicht der Fall, so stehen verschiedene Verfahren zur Verfügung (numerisch, Störungstheorie, Variationsrechnung) über die Näherungen der exakten Lösungen bestimmt werden können. Es lässt sich jedoch im Allgemeinen nicht bestimmen, ob oder wie gut diese Näherungen gegen eine exakte Lösung konvergieren (Variationsrechnung und Störungstheorie), bzw. sind sie teils mit enormem Rechenaufwand verbunden (numerische Behandlung).

Neben den exakt lösbaren und nur näherungsweise lösbaren Potenzialen existiert eine Klasse der sogenannten quasi-exakt lösbaren Potenziale. Für diese können auf analytischem Wege aus einem endlichen Satz an Basisfunktionen endlich viele, energetisch niedrig liegende, exakte Eigenlösungen und Eigenenergien konstruiert werden. Man spricht dabei von quasi-exakt lösbaren Potenzialen, da die gefundenen Lösungen exakt sind, aber nur einige Lösungen bestimmt werden können und nicht wie bei exakt lösbaren Potenzialen im Allgemeinen unendlich viele. Mit Hilfe dieser exakten Lösungen können dann beispielsweise Näherungsverfahren getestet werden, wie in [Saa 06] angeführt und in [Tat 87] für die Hill-Determinanten-Methode am anhar-

monischen Oszillator durchgeführt. Zu den quasi-exakt lösbaren Potenzialen gehören z.B. das generalisierte Coulombpotenzial und der anharmonische Oszillator. Da über Koordinatentransformationen unter bestimmten Bedingungen verschiedene Potenzialprobleme aufeinander abgebildet werden können, ist es möglich, weitere Potenzialprobleme zu konstruieren, zu denen dann einige exakte Lösungen bekannt sind, wie in [Zno 00] u.A. mit einem quartischen Potenzial durchgeführt. Beispielsweise kann das N-dimensionale Coulomb-Problem auf den N-dimensionalen harmonischen Oszillator abgebildet werden, wie in [Gra 72] gezeigt. Wie in [Bag 03] gezeigt, lassen sich exakt und quasi-exakt lösbare Potenziale auch vereinheitlicht behandeln.

Quasi-exakte Lösbarkeit kann für alle Spektralprobleme auftreten, sodass die in diesem Zusammenhang gefundenen Lösungen und Ergebnisse nicht nur im Rahmen der Quantenmechanik relevant sind. Die Behandlung dieser Klasse von Potenzialen soll im Rahmen der vorliegenden Bachelorarbeit exemplarisch am Beispiel zweier quasi-exakt lösbarer Potenziale polynomialer Gestalt untersucht werden. Diese weisen ein diskretes Eigenenergiespektrum auf. Konkret sind das ein sextisches (anharmonischer Oszillator) und ein quartisches Potenzial in einer Raumdimension. Außerdem wird eine allgemeine Betrachtung der Vereinbarkeit von Normierung und algebraischen Lösbarkeitsbedingungen für polynomiale Potenziale angeführt.

## 2 Eigenlösungen quasi-exakt lösbarer Potenziale

### 2.1 Schrödingergleichung in einer Dimension

Für ein einzelnes, spinloses, ungeladenes Teilchen der Masse  $m$  am Ort  $x$  im Potenzial  $V(x)$  schreibt sich der nicht-relativistische Hamiltonoperator in einer Dimension als

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \quad (2.1)$$

Die stationäre Schrödingergleichung

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (2.2)$$

mit  $\hat{H}$  aus (2.1) wird dann durch Eigenzustände  $\Psi(x)$  mit der Eigenenergie  $E$  gelöst. Da ein reales Teilchen dauerhaft irgendwo im Raum existieren muss, muss seine Aufenthaltswahrscheinlichkeit über den gesamten Raum integriert eins ergeben, d.h. die Wellenfunktion normiert sein:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1 \quad (2.3)$$

Oft sind die Eigenenergien  $E$  dabei nicht kontinuierlich, sondern diskret, sodass ein orthonormaler Satz aus Eigenzuständen  $\Phi_j$  mit zugehörigen Eigenenergien  $E_j$  den Hilbertraum der Eigenlösungen des Hamiltonoperators aufspannt:

$$\langle \Phi_j | \Phi_{j'} \rangle = \delta_{j,j'}$$

Sind  $m$  Eigenzustände  $\Phi_{\text{ent},j}(x)$  entartet, d.h. haben den gleichen Eigenwert  $E_{\text{ent}}$ , so können zusätzlich Eigenzustände  $\Psi(x)$  mit dem selben Eigenwert  $E_{\text{ent}}$  als Linearkombination dieser entarteten Eigenzustände gebildet werden:

$$\Psi(x) = \sum_j c_j \Phi_{\text{ent},j}(x)$$

mit  $c_j = 0$  für  $E_j \neq E_{\text{ent}}$

Wegen der Normierungsbedingung (2.3) muss dabei für die Koeffizienten  $c_j$  gelten:

$$\sum_j |c_j|^2 = 1$$

### 2.2 Basisfunktionen polynomialer Potenziale

Für quasi-exakt lösbare Potenziale lassen sich, wie einleitend angemerkt, endlich viele exakte Lösungen  $\Psi(x)$  über einen ebenfalls endlichen Satz aus  $n + 1$  Basisfunktionen  $f_k$  (mit  $k = 0, 1, \dots, n$ ) bestimmen. Diese Funktionen spannen einen

Hilbertraum der Dimension  $n + 1$  auf, zu dem die Menge der auf diese Weise bestimmbaren Eigenlösungen der Schrödingergleichung (2.2) einen Untervektorraum bildet. Die maximal bestimmbare Anzahl linear unabhängiger, exakter Lösungen entspricht daher der Dimension des Hilbertraums der Basisfunktionen  $n + 1$ . Unter Umständen können dies auch weniger als  $n + 1$  bestimmbare Eigenfunktionen sein, z.B. wenn nur gerade oder ungerade Basisfunktion zu Eigenfunktionen beitragen, wie dies beim sextischen Potenzial auftreten wird.

Für polynomiale Potenziale haben diese Eigenfunktionen die Gestalt einer Exponentialfunktion mit polynomialem Exponenten  $p_2(x)$ , die mit einem Polynom  $p_1(x)$  multipliziert wird:

$$\Psi(x) = p_1(x) \cdot \exp [p_2(x)] . \quad (2.4)$$

Diese Gestalt wird nachvollziehbar, indem man (2.1) mit (2.4) in die stationäre Schrödingergleichung (2.2) einsetzt. Die Exponentialfunktion bleibt in der zweifachen Ableitung nach  $x$  erhalten und kürzt sich so aus der resultierenden Gleichung heraus. Es verbleiben ausschließlich polynomiale Terme, die sich aus dem Potenzialterm  $V(x)$ , der Energie  $E$  sowie dem Polynom  $p_1(x)$  und gemäß der Ketten- und Produktregel den Ableitungen  $p_1'(x)$ ,  $p_2'(x)$  und  $p_2''(x)$  bilden:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( p_1''(x) + 2p_1'(x)p_2'(x) + p_1(x)p_2''(x) + p_1(x)p_2'^2(x) \right) + (V(x) - E) p_1(x) = 0$$

Die Polynome  $p_2(x)$  und  $p_1(x)$  müssen dann so gewählt sein, dass diese Gleichung in allen Potenzen in  $x$  separat erfüllt ist. Im Allgemeinen umfasst der Potenzialterm  $V(x)$  Potenzen in  $x$  größer als Null, sodass in  $V(x) \cdot p_1(x)$  Terme auftreten, deren Potenzen den Grad des Polynoms  $p_1(x)$  übersteigen. Terme solcher Potenzen können außerdem durch die Ableitungen des Polynoms  $p_2(x)$  erzeugt werden. Dabei ist die maximal erreichbare Potenz durch  $p_2'^2(x)$  bestimmt, sobald der Grad des Polynoms  $p_2(x)$  größer Null ist. Um sicherzustellen, dass die stationäre Schrödingergleichung (2.2) erfüllt sein kann, muss  $p_2(x)$  daher so gewählt werden, dass  $p_2'^2(x)$  alle Potenzen beinhaltet, die im Potenzialterm auftreten. Andernfalls ist im Allgemeinen nicht klar, ob alle Potenzen aus dem Potenzialterm auch über die zweifache Ableitung erreicht werden und sich dadurch aufheben können. Ist dies nicht der Fall, so folgt die Trivillösung  $\Psi(x) = 0$ .

Umfasst der Potenzialterm  $x$  beispielsweise in sechster und vierter Potenz, so muss  $x$  in  $p_2(x)$  in vierter und zweiter Potenz auftreten, sodass:

$$p_2(x) = \frac{b_1}{4} \cdot x^4 + \frac{b_2}{2} \cdot x^2$$

$$p_2'^2(x) = \left( b_1 x^3 + b_2 x \right)^2 = b_1^2 x^6 + 2b_1 b_2 x^4 + b_2^2 x^2$$

Aufgrund der geforderten Normierbarkeit (2.3) muss die Potenz des führenden Terms aus  $p_2(x)$  dabei gerade und dessen Koeffizient negativ sein, sodass  $\Psi(x)$  im Unendlichen gegen Null geht.

Wie zuvor erwähnt, sollen dann Eigenfunktionen als Überlagerung von endlich vielen Basisfunktionen konstruiert werden. Dazu entwickelt man das Polynom  $p_1(x)$  als Potenzreihe und verwendet Basisfunktionen der Form

$$f_k(x) = x^k \cdot \exp [p_2(x)] , \quad (2.5)$$

wobei  $k = 0, 1, \dots, n$ . Die maximal in  $p_1(x)$  auftretende Potenz ist also durch  $n$  gegeben. Alle Terme höherer Potenzen, die durch das Anwenden des Hamiltonoperators auf eine zur Eigenlösung beitragende Basisfunktion entstehen, müssen sich also wegheben, entweder mit dem Potenzialterm  $V(x)$  oder einem durch eine andere Basisfunktion erzeugten Term. Hieraus entstehen Bedingungen für die Potenzialparameter und die Koeffizienten des Polynoms  $p_2(x)$ .

Zur Konstruktion von Eigenfunktionen wird daher zunächst die Wirkung des Hamiltonoperators auf die Basisfunktionen bestimmt. Anschließend werden sukzessive die Koeffizienten der Potenzen, die nicht über andere Basisfunktionen ausgeglichen werden können, unter Berücksichtigung des Potenzialterms gleich Null gesetzt. Nahelegender Weise wird dies zunächst für  $f_n$  durchgeführt, da aus dieser Basisfunktion Potenzen in  $x$  resultieren, die nicht über andere Basisfunktionen erreicht werden. Anschließend wird das Prozedere mit den bereits gewonnenen Bedingungen für die folgenden Basisfunktionen  $f_{n-1}, f_{n-2}, \dots$  fortgeführt, bis keine Potenzen mehr resultieren, die den Grad  $n$  übersteigen. Dies soll im Folgenden für zwei polynomiale Potenziale quartischer bzw. sextischer Form durchgeführt werden.

Die zuvor beschriebene Vorgehensweise liefert rein algebraische Lösbarkeitsbedingungen, die aus dem endlichen Grad der Potenzreihenentwicklung des Polynoms  $p_1(x)$  folgen, d.h. aus der endlichen Anzahl von Basisfunktionen. Diese Lösbarkeitsbedingungen können für die im Folgenden untersuchten Potenziale mit [Gon 94] verglichen werden. Zusätzlich resultieren gewisse Einschränkungen durch die physikalisch motivierte Forderung der Normierbarkeit der Eigenfunktionen. Diese werden, wenn möglich, anschließend berücksichtigt (vergleiche dazu die Wahl des Polynoms  $p_2(x)$  oben).

In der Literatur werden häufig allgemeine, rekursive Bestimmungsgleichungen der in dem Polynom  $p_1(x)$  auftretenden Koeffizienten der einzelnen Potenzen bzw. Basisfunktionen  $f_k(x)$  abgeleitet. Diese werden hier nicht hergeleitet, sondern die Koeffizienten lediglich konkret für einige Lösungen berechnet.

### 3 Sextisches Potenzial $V_6$

Zunächst soll ein sextisches Potenzial der Form

$$V_6(x) = A \cdot x^6 + B \cdot x^4 + C \cdot x^2 =: \frac{\hbar^2}{2m} (\tilde{A}x^6 + \tilde{B}x^4 + \tilde{C}x^2) \quad (3.1)$$

betrachtet werden, wobei  $A =: \hbar^2 \tilde{A}/(2m)$ ,  $B =: \hbar^2 \tilde{B}/(2m)$  und  $C =: \hbar^2 \tilde{C}/(2m)$  reellwertige Parameter bezeichnen. Die mit einer Tilde versehenen Parameter werden dabei im Folgenden häufig verwendet, um unnötigen Schreibaufwand zu vermeiden. Wie in Abschnitt 3.4 begründet, soll insbesondere der Fall  $A > 0$  betrachtet werden. Die zugehörige stationäre Schrödingergleichung

$$\left( \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_6(x) \right) \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (3.2)$$

lässt sich für obiges Potenzial analytisch nicht allgemein lösen. Allerdings kann über die durch  $k$  parametrisierten Basisfunktionen

$$f_k(x) = x^k \cdot \exp \left[ -\frac{\mu}{2} x^2 - \frac{\nu}{4} x^4 \right] \quad (3.3)$$

mit den Parametern  $\mu, \nu$  eine endliche Anzahl exakter Lösungen konstruiert werden. Die Form des Exponenten ergibt sich dabei wie im vorherigen Abschnitt erläutert. Mit der in Abschnitt 2 beschriebenen Bedingung, dass der Grad des Polynoms  $p_1(x)$  aus (2.4) endlich ist, sind Bedingungen an die Potenzialparameter  $A, B, C$  verbunden. Im Folgenden werden diese algebraischen Lösbarkeitsbedingungen hergeleitet sowie die Normierungsbedingung ausgewertet.

#### 3.1 Basisfunktionen und Lösbarkeitsbedingungen

Um exakte Lösungen der stationären Schrödingergleichung (3.2) als Überlagerung endliche vieler Basisfunktionen (3.3) konstruieren zu können, wird zunächst die Wirkung des zugehörigen Hamiltonoperators  $\hat{H}$  (siehe (2.1) mit (3.1)) auf die einzelnen Basisfunktionen  $f_k(x)$  untersucht. Wie bei der Wahl der Basisfunktion angemerkt, bleibt die Exponentialfunktion in den dabei auftretenden Termen erhalten und tritt

mit Vorfaktoren polynomialer Form in  $x$  auf:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}f_k(x) &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_6(x) \right) x^k \cdot e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4} & a &:= \frac{\hbar^2}{2m} \\
 &= -a \frac{\partial}{\partial x} \left( \left[ k \cdot x^{k-1} - x^k (\mu x + \nu x^3) \right] e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4} \right) + V_6(x) f_k(x) \\
 &= -a \left[ k(k-1)x^{k-2} - 2kx^{k-1} (\mu x + \nu x^3) - x^k (\mu + 3\nu x^2) \right. \\
 &\quad \left. + x^k (\mu x + \nu x^3)^2 \right] e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4} + V_6(x) f_k(x) \\
 &= -a \left[ k(k-1)x^{k-2} - 2k (\mu x^k + \nu x^{k+2}) - x^k \mu - 3\nu x^{k+2} \right. \\
 &\quad \left. + x^k (\mu^2 x^2 + 2\mu\nu x^4 + \nu^2 x^6) \right] e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4} + V_6(x) f_k(x) \\
 &= -a \left[ k(k-1)x^{k-2} - (2k+1)\mu x^k + (\mu^2 - (3+2k)\nu - \tilde{C}) x^{k+2} \right. \\
 &\quad \left. + (2\mu\nu - \tilde{B}) x^{k+4} + (\nu^2 - \tilde{A}) x^{k+6} \right] e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4} \tag{3.4}
 \end{aligned}$$

Der polynomiale Vorfaktor in (3.4) umfasst die Potenzen  $x^{k-2}$ ,  $x^k$ ,  $x^{k+2}$ ,  $x^{k+4}$  und  $x^{k+6}$ . Insbesondere treten im Vorfaktor nur gerade Potenzen in  $x$  für  $k$  gerade und nur ungerade Potenzen in  $x$  für  $k$  ungerade auf. Dadurch vermischen die Beiträge aus Basisfunktionen mit geradem bzw. ungeradem  $k$  nicht, sodass diese im Folgenden separat betrachtet werden können. Außerdem übersteigt die Potenz der letzten drei Terme die des Vorfaktors der ursprünglichen Basisfunktion, nämlich um zwei, vier und sechs Potenzen. Wird der Hamiltonoperator also auf eine Basisfunktion  $f_k$  angewandt mit  $k > n - 6$ , so resultieren Terme, deren Vorfaktor die maximal über Basisfunktionen darstellbare Potenz  $n$  übersteigt. Die Terme dieser Potenzen müssen dann in einer Eigenfunktion verschwinden, indem sie entweder durch Beiträge anderer Basisfunktionen  $f_k$  aufgehoben werden oder sich der entsprechende Vorfaktor aus (3.4) zu Null ergibt.

Zur Potenz  $n + 2$  ergibt sich ein Beitrag für die Basisfunktionen mit  $k = n$ ,  $n - 2$  und  $n - 4$ , zur Potenz  $n + 4$  für  $k = n$  und  $n - 2$  und zur Potenz  $n + 6$  nur aus der Basisfunktion mit  $k = n$ . Im letzten Fall kann der entsprechende Term also nicht durch eine andere Basisfunktion kompensiert werden, sodass der Vorfaktor des Terms proportional zu  $x^{k+6}$  für  $k = n$  Null ergeben muss. Dies führt direkt auf die Lösbarkeitsbedingung

$$\nu^2 = \tilde{A}. \tag{3.5}$$

Der Parameter  $\nu$  muss somit rein reell sein für  $\tilde{A} \geq 0$  und rein imaginär für  $\tilde{A} < 0$ . Außerdem wird  $\nu$  direkt über den Parameter  $A$  des Potentials festgelegt, sodass die Basisfunktion  $f_{n-2}$  zur Potenz  $k + 6 = n + 4$  ebenfalls keinen Beitrag liefert. Somit

muss also auch der Koeffizient der Potenz  $k + 4$  für  $k = n$  gleich Null sein, da dieser Beitrag durch keine andere Basisfunktion  $f_k$  ausgeglichen werden kann. Dies führt zu einer zweiten Lösbarkeitsbedingung

$$2\mu\nu = \tilde{B}. \quad (3.6)$$

Durch die Bedingungen (3.5) und (3.6) werden also beide Parameter  $\mu$  und  $\nu$  durch die Parameter des Potentials bestimmt. Da die beiden gerade zu Null bestimmten Vorfaktoren der Terme proportional zu  $x^{k+6}$  und  $x^{k+4}$  aus (3.4) unabhängig von  $k$  sind, tragen die Basisfunktionen  $f_k$  mit  $k = n - 2$  und  $k = n - 4$  also ebenfalls nicht zur Potenz  $x^{n+2}$  bei. Dadurch muss sich auch der von  $k$  abhängige Vorfaktor zu  $x^{k+2}$  für  $k = n$  zu Null ergeben. Dies führt in Übereinstimmung mit [Cha 84] auf

$$\mu^2 - (3 + 2n)\nu = \tilde{C}. \quad (3.7)$$

Für die Basisfunktionen mit  $k < n$  ergeben sich hingegen von Null verschiedene Beiträge in  $(k + 2)$ -ter Potenz. Insbesondere ergibt sich für  $k = n - 1$  ein Beitrag ungleich Null mit  $x$  in  $(n + 1)$ -ter Potenz, der nicht durch Potenzialterme oder andere Basisfunktionen kompensiert werden kann.  $f_{n-1}$  kann also nicht zu einer Eigenfunktion beitragen, zu der  $f_n$  beiträgt. Da alle weiteren Funktionen  $f_{n-3}, f_{n-5}, \dots$  jeweils Terme ungleich Null in der  $(k + 2)$ -ten Potenz liefern folgt rekursiv, dass keine dieser Funktionen zur Eigenfunktion beiträgt.

Es tragen also bei ungeradem  $n$  nur diejenigen  $(n - 1)/2$  Basisfunktionen mit ungeradem  $k$  und für gerades  $n$  die  $n/2$  Basisfunktionen mit geradem  $k$  bei.

Diese Bedingungen vereinfachen den Ausdruck (3.4) zu

$$\hat{H}f_k(x) = -a \left( k(k - 1)x^{k-2} - (2k + 1)\mu x^k + 2(n - k)x^{k+2} \right) e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4}. \quad (3.8)$$

Ein quasi-exakt lösbares, sextisches Potenzial lässt sich also in folgender Form darstellen:

$$V_6(x) = a \left( \nu^2 x^6 + 2\mu\nu x^4 + \left( \mu^2 - (3 + 2n)\nu \right) x^2 \right) \quad (3.9)$$

Die drei zuvor hergeleiteten Bedingungen sollen nun in eine Lösbarkeitsbedingung an die Potenzialparameter überführt werden. Dazu wird (3.6) nach  $\mu$  umgeformt und in (3.7) eingesetzt. Laut (3.5) gilt zusätzlich  $\nu = \pm \tilde{A}^{1/2}$ . Insgesamt ergibt sich:

$$\begin{aligned} & \mu^2 - (3 + 2n)\nu = \tilde{C} \\ \Leftrightarrow & \frac{\tilde{B}^2}{4\nu^2} - (3 + 2n)\nu - \tilde{C} = 0 \\ \Leftrightarrow & \frac{\tilde{B}^2}{4\tilde{A}} \pm (3 + 2n)\tilde{A}^{1/2} - \tilde{C} = 0 \\ \Leftrightarrow & \tilde{B}^2 \pm 4(3 + 2n)\tilde{A}^{3/2} - 4\tilde{A}\tilde{C} = 0 \end{aligned} \quad (3.10)$$

Nach [Gon 94] lässt sich zeigen, dass sich diese rein algebraischen Lösbarkeitsbedingungen an das Potenzial wie folgt formulieren lassen:

$$16A^3(4n' + 5)(4n' + 3) \pm 32(n' + 1)A^{3/2} (B^2 - 4AC) + (B^2 - 4AC)^2 = 0, \quad (3.11)$$

$$A \geq 0.$$

Dabei bezeichnet  $n'$  die Anzahl der Basisfunktionen mit gerader Potenz für  $n$  gerade und die Anzahl derer mit ungerader Potenz für  $n$  ungerade. Diese Bedingung ist, wie nun gezeigt wird, äquivalent zu (3.10). Passt man die Bezeichnungen über

$$n' = \begin{cases} n/2 & n \text{ gerade} \\ (n-1)/2 & n \text{ ungerade} \end{cases} \quad (3.12)$$

an die dort verwendete Definition von  $n'$  an, so muss (3.10) abhängig von der Parität von  $n$  transformiert werden:

$$\tilde{B}^2 \pm 4(3 + 4n')\tilde{A}^{3/2} - 4\tilde{A}\tilde{C} = 0 \quad n \text{ gerade} \quad (3.13)$$

$$\tilde{B}^2 \pm 4(5 + 4n')\tilde{A}^{3/2} - 4\tilde{A}\tilde{C} = 0 \quad n \text{ ungerade} \quad (3.14)$$

Multipliziert man beide Gleichungen miteinander, so ergibt sich eine unabhängig von der Parität von  $n$  gültige Lösbarkeitsbedingung:

$$\begin{aligned} & (\tilde{B}^2 \pm 4(3 + 4n')\tilde{A}^{3/2} - 4\tilde{A}\tilde{C}) (\tilde{B}^2 \pm 4(5 + 4n')\tilde{A}^{3/2} - 4\tilde{A}\tilde{C}) = 0 \\ \Leftrightarrow & 16(4n' + 3)(4n' + 5)\tilde{A}^3 \pm 32(n' + 1) (\tilde{B}^2 - 4\tilde{A}\tilde{C}) + (\tilde{B}^2 - 4\tilde{A}\tilde{C})^2 = 0 \end{aligned}$$

Diese ist äquivalent zur Bedingung (3.11) aus [Gon 94], da dort  $a = 1$  gesetzt wird, sodass die Unterscheidung zwischen  $A$ ,  $B$ ,  $C$  und  $\tilde{A}$ ,  $\tilde{B}$ ,  $\tilde{C}$  hinfällig ist.

Zusätzlich stellt sich im physikalischen Kontext die Forderung der Normierbarkeit an die Eigenfunktionen. Hierfür ist es nötig, dass  $\text{Re}(\nu) > 0$  oder  $\text{Re}(\nu) = 0 \wedge \text{Re}(\mu) > 0$ . Für  $\tilde{A} > 0$  folgt aus (3.5), dass  $\nu$  reell ist und wegen der Normierbarkeit außerdem positiv, sodass nur der Fall des Minuszeichens aus (3.10) und (3.11) zulässig ist. Für  $\tilde{A} = 0$  folgt aus (3.5), dass  $\nu = 0$  und mit (3.6), dass  $\tilde{B} = 0$  gelten muss. Mit den Forderungen  $\text{Re}(\mu) > 0$  und  $\tilde{C} \in \mathbb{R}$  folgt aus (3.7), dass  $C > 0$ . Dieser Fall entspricht dem exakt lösbaren harmonischen Oszillator und sei daher im Folgenden nicht weiter berücksichtigt. Für  $\tilde{A} < 0$  folgt nach (3.5), dass  $\text{Re}(\nu) = 0$  ist. Mit der Normierbarkeitsbedingung  $\text{Re}(\mu) > 0$  und (3.6) führt dies auf ein komplexwertiges  $\tilde{B}$ , sodass dieser Fall ebenfalls auszuschließen ist.

Aus der algebraischen Lösbarkeitsbedingung mit der Forderung der Normierbarkeit

folgt für reellwertige Potenzialparameter und unter Ausschluss des harmonischen Oszillators (mit  $\tilde{A} = \tilde{B} = 0$ ) die physikalische Lösbarkeitsbedingung:

$$\begin{aligned} & \tilde{B}^2 - 4(3 + 2n)\tilde{A}^{3/2} - 4\tilde{A}\tilde{C} = 0 \\ \Leftrightarrow & 16(4n' + 3)(4n' + 5)\tilde{A}^3 - 32(n' + 1) \left( \tilde{B}^2 - 4\tilde{A}\tilde{C} \right) + \left( \tilde{B}^2 - 4\tilde{A}\tilde{C} \right)^2 = 0 \end{aligned} \quad (3.15)$$

Dabei gilt jeweils  $\tilde{A} > 0$ .

### 3.2 Schrödingergleichung für ungerade und gerade Eigenfunktionen

Nun sollen Eigenfunktionen  $\Psi(x)$  als Linearkombination der zuvor betrachteten Basisfunktionen gebildet werden. Die Koeffizienten des Potenzialterms  $\tilde{A}$ ,  $\tilde{B}$ ,  $\tilde{C}$  sollen im Folgenden die oben gefundene Lösbarkeitsbedingung für  $\tilde{A} > 0$  erfüllen und gemäß den hergeleiteten Beziehungen die Parameter  $\mu$  und  $\nu$  bestimmen. Außerdem tragen stets nur diejenigen Basisfunktionen  $f_k$  zur Eigenfunktion bei, deren  $k$  die selbe Parität wie  $n$  hat. Der Übersichtlichkeit halber ist es sinnvoll, den Satz der Basisfunktionen auf die jeweils beitragenden zu reduzieren. Dazu werden diese über den an die Parität angepassten Index  $l$  abgezählt:

$$l = \begin{cases} \frac{k}{2} & n \text{ gerade} \\ \frac{k-1}{2} & n \text{ ungerade} \end{cases} \quad (3.16)$$

Hiermit lassen sich die geraden ( $\Psi_g(x)$ ) und ungeraden ( $\Psi_u(x)$ ) Eigenfunktionen wie folgt darstellen:

$$\Psi_g(x) = \sum_{l=0}^{n/2} c_l \cdot x^{2l} \exp \left[ -\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4 \right] \quad n \text{ gerade} \quad (3.17)$$

$$\Psi_u(x) = \sum_{l=0}^{(n-1)/2} c_l \cdot x^{2l+1} \exp \left[ -\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4 \right] \quad n \text{ ungerade} \quad (3.18)$$

Häufig wird auch eine einheitliche Schreibweise mit einem Paritätsparameter  $p$  verwendet (so auch in [Cha 84]):

$$p = \begin{cases} 0 & n \text{ gerade} \\ 1 & n \text{ ungerade} \end{cases} \quad (3.19)$$

$$\Psi(x) = \sum_{l=0}^{(n-p)/2} c_l \cdot x^{2l+p} \exp \left[ -\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4 \right] \quad (3.20)$$

Da die Basisfunktionen ein Erzeugendensystem der Eigenfunktionen darstellen, bietet es sich an, den Hamiltonoperator als Darstellungsmatrix bezüglich dieser Basis

zu schreiben. Diese bildet dann Basisfunktionen  $f_k$  auf die Basisfunktionen  $f_{k-2}$ ,  $f_k$  und  $f_{k+2}$  ab, wie in (3.8) gezeigt. Hierzu wird ein Koeffizienten-Vektor  $\vec{c}$  sowie ein Vektor der Basisfunktionen  $\vec{f}(x)$  eingeführt:

$$\vec{c} = \begin{cases} (c_0, c_1, \dots, c_{n/2}) & n \text{ gerade} \\ (c_0, c_1, \dots, c_{(n-1)/2}) & n \text{ ungerade} \end{cases} \quad (3.21)$$

$$\vec{f}(x) = \begin{cases} (f_0(x), f_2(x), \dots, f_n(x)) & n \text{ gerade} \\ (f_1(x), f_3(x), \dots, f_n(x)) & n \text{ ungerade} \end{cases} \quad (3.22)$$

Die Indizierung der Einträge in  $\vec{c}$  orientiert sich dabei an der Benennung aus (3.20) mit (3.16), während die Indizes der Einträge aus  $\vec{f}(x)$  der Darstellung in (3.3) entsprechen. Die Eigenfunktionen ergeben sich dann gemäß

$$\Psi(x) = \vec{c} \cdot \vec{f}(x). \quad (3.23)$$

Der Hamiltonoperator ergibt sich gemäß (3.8) für ein gerades  $n$  mit  $l$  der Spaltennummer zu:

$$\hat{H}_g = \begin{pmatrix} -\mu & & & & & \\ 2n\nu & \dots & \mathcal{O} & \dots & \mathcal{O} & \\ 0 & & & & & \\ & & l(4l-2) & & & \\ \vdots & \dots & -(4l+1)\mu & \dots & \vdots & \\ & & (2n-4l)\nu & & & \\ & & & & 0 & \\ \mathcal{O} & \dots & \mathcal{O} & \dots & n(n-1) & \\ & & & & -(2n+1)\mu & \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

Für  $n$  ungerade ergibt sich analog:

$$\hat{H}_u = \begin{pmatrix} -3\mu & & & & & \\ 2(n-1)\nu & \dots & \mathcal{O} & \dots & \mathcal{O} & \\ 0 & & & & & \\ & & l(4l+2) & & & \\ \vdots & \dots & -(4l+3)\mu & \dots & \vdots & \\ & & 2(n-1-2l)\nu & & & \\ & & & & 0 & \\ \mathcal{O} & \dots & \mathcal{O} & \dots & n(n-1) & \\ & & & & -(2n+1)\mu & \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

Dabei sind in der mittleren Spalte jeweils die Einträge der  $(l - 1)$ -ten,  $l$ -ten und  $(l + 1)$ -ten Zeile angegeben. Alle übrigen Einträge einer Spalte sind gleich Null. Mit dieser Darstellungsweise spaltet auch die Schrödingergleichung in eine Gleichung für ungerade und eine für gerade Eigenfunktionen auf:

$$\hat{H}_g \vec{c} = E \vec{c}, \quad \hat{H}_u \vec{c} = E \vec{c} \quad (3.26)$$

### 3.3 Lösung für niedrige Dimensionen

Nun sollen exemplarisch Eigenlösungen für Fälle niedriger Dimension bestimmt werden, d.h. zu kleinen Zahlen  $n$ . Dazu wird die zugehörige stationäre Schrödingergleichung in Matrixschreibweise aufgestellt und dann über die Determinante der resultierenden Matrix gelöst. Dabei ergibt sich für  $n = 2$  und  $n = 3$  eine quadratische Bestimmungsgleichung, welche über die  $pq$ -Formel gelöst werden kann. Für  $n = 4$  und  $n = 5$  resultiert jeweils eine kubische Bestimmungsgleichung, die mit Hilfe der Cardanischen Formeln gelöst werden kann. Für größere  $n$  ist das Gleichungssystem im Allgemeinen nur mit deutlich erhöhtem Rechenaufwand lösbar, sodass diese Fälle hier nicht behandelt werden. Im Folgenden seien die Lösungen für  $n = 2$ ,  $n = 3$ ,  $n = 4$  und  $n = 5$  gezeigt. In den zugehörigen Abbildungen (1-6) wird stets  $a = 1$  gesetzt.

$n = 2$

Für den Fall  $n = 2$  ergibt sich die Schrödingergleichung in Matrixschreibweise zu:

$$\begin{aligned} & -a \begin{pmatrix} -\mu & 2 \\ 4\nu & -5\mu \end{pmatrix} \cdot \vec{c} = E \vec{c} & \tilde{E} := E/a \\ \Leftrightarrow & -a \begin{pmatrix} -\mu + \tilde{E} & 2 \\ 4\nu & -5\mu + \tilde{E} \end{pmatrix} \cdot \vec{c} = 0 \end{aligned} \quad (3.27)$$

Diese Gleichung ist genau dann lösbar, wenn die Determinante der Matrix gleich Null ist:

$$\begin{aligned} \text{Det}(\mathcal{M}) &= (-\mu + \tilde{E})(-5\mu + \tilde{E}) - 8\nu \stackrel{!}{=} 0 \\ \Leftrightarrow & \tilde{E}^2 - 6\mu\tilde{E} + 5\mu^2 - 8\nu = 0 \\ \Rightarrow & \tilde{E}_{\pm} = 3\mu \pm \sqrt{4\mu^2 + 8\nu} \end{aligned} \quad (3.28)$$

Dabei wurde die  $pq$ -Formel mit  $p = -6\mu$  und  $q = 5\mu^2 - 8\nu$  verwendet. Insbesondere ist der Wurzelterm stets reell, da  $\nu$  positiv ist. Es ergeben sich also zwei gerade,

exakte Lösungen  $\Psi_{g,0}$ ,  $\Psi_{g,1}$  mit den Eigenenergien  $E_0$  und  $E_1$ . Dabei entspricht die energetisch tiefere Lösung  $\Psi_{g,0}$  dem Minuszeichen in Gleichung (3.28). Um die Koeffizienten  $c_0$  und  $c_1$  der Basisfunktionen zu ermitteln, setzt man  $\tilde{E}_\pm$  in (3.27) ein und nutzt die Normierungsbedingung. Eine analytische Normierung gemäß (2.3) ist hier durch die Gestalt der Basisfunktionen allerdings recht aufwendig. Da die Normierung auf eins der im Folgenden bestimmten Wellenfunktionen in Abbildung 1 ohnehin zu Gunsten der Darstellbarkeit aufgegeben wird, sei hier der Parameter  $c_0 = N$  mit  $N$  einer Normierungskonstante gewählt, sodass beide Wellenfunktionen die gleiche Gesamtaufenthaltswahrscheinlichkeit liefern.  $N$  wird dann so bestimmt, dass die Wellenfunktionen in den Abbildungen gut erkennbar sind. Der zweite Koeffizient kann so über die erste Zeile aus (3.27) bestimmt werden:

$$\begin{aligned} 0 &= -a \left[ \left( 2\mu \pm \sqrt{4\mu^2 + 8\nu} \right) c_0 + 2c_1 \right] & c_0 &= N \\ \Leftrightarrow c_1 &= -N \left( \mu \pm \sqrt{\mu^2 + 2\nu} \right) \end{aligned} \quad (3.29)$$

Die beiden exakt bestimmbaren, geraden Lösungen zu einem sextischen Potenzial für  $n = 2$  ergeben sich zu

$$\Psi_{g,0}(x) = N \left[ 1 - \left( \mu - \sqrt{\mu^2 + 2\nu} \right) \cdot x^2 \right] e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4}, \quad (3.30)$$

$$\Psi_{g,1}(x) = N' \left[ 1 - \left( \mu + \sqrt{\mu^2 + 2\nu} \right) \cdot x^2 \right] e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4}, \quad (3.31)$$

wobei die Parameter  $\mu$  und  $\nu$  über die Bedingungen  $\nu = A^{1/2}$ ,  $\mu = B/(2A^{1/2})$  bestimmt sind. Die zugehörigen Eigenenergien lauten:

$$E_{g,0} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( 3\mu - 2\sqrt{\mu^2 + 2\nu} \right) \quad (3.32)$$

$$E_{g,1} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( 3\mu + 2\sqrt{\mu^2 + 2\nu} \right) \quad (3.33)$$

Beide Lösungen sind für ein Potenzial mit den Parametern  $A = 1$ ,  $B = -8$ ,  $C = 9$ ,  $\mu = -4$ ,  $\nu = 1$  in Abbildung 1 dargestellt. Das Nullniveau in  $y$ -Richtung wurde dabei auf die jeweilige Eigenenergie gelegt. Die Funktionen wurden dann auf die Gesamtaufenthaltswahrscheinlichkeit 100 normiert ( $N \approx 9,540 \cdot 10^{-2}$ ,  $N' \approx 6,289 \cdot 10^{-1}$ ).

### 3. SEXTISCHES POTENZIAL $V_6$

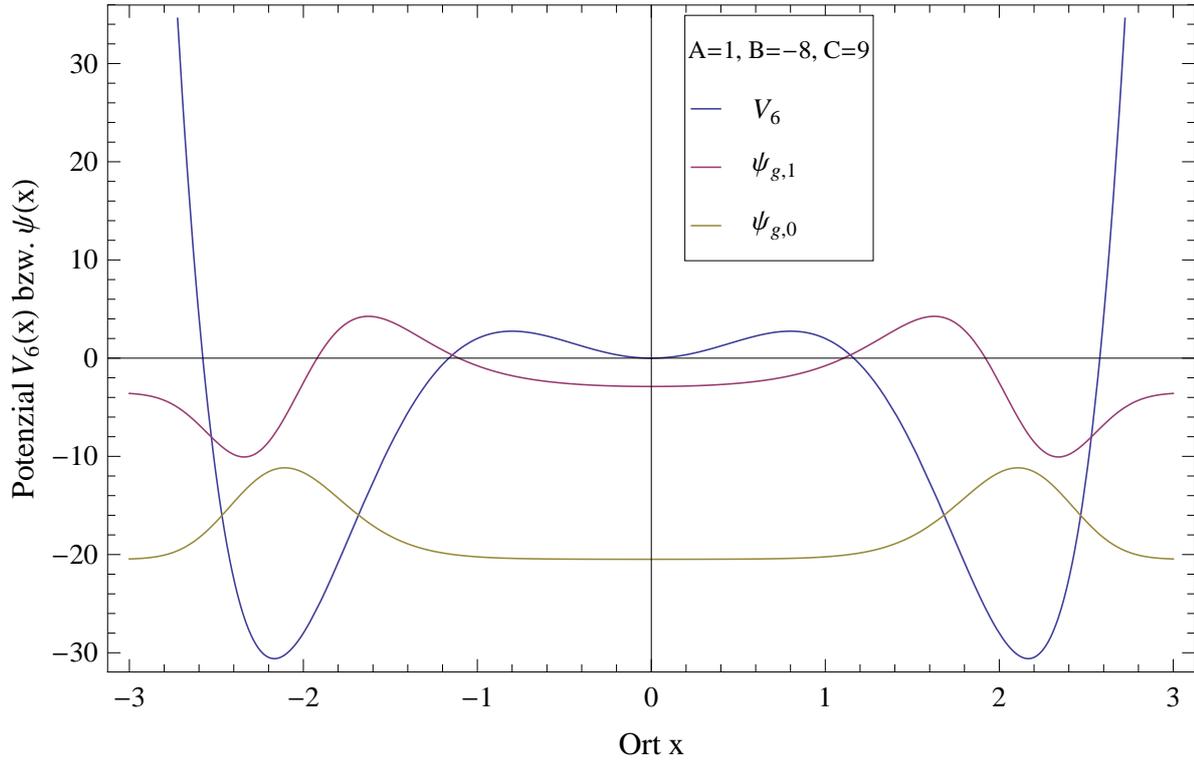


Abbildung 1: Sextisches Potenzial  $V_6(x)$  mit den Parametern  $A = 1$ ,  $B = -8$  und  $C = 9$ , aufgetragen gegen  $x$  (blau). Eingezeichnet sind beide für  $n = 2$  bestimmbaren, exakten Lösungen  $\Psi_{g,0}(x)$  und  $\Psi_{g,1}(x)$ . Das Nullniveau in  $y$ -Richtung wurde auf die jeweilige Eigenenergie gesetzt.

$n = 3$

Genau wie für den Fall  $n = 2$  hat der Hamiltonoperator auch für  $n = 3$  die Form einer  $2 \times 2$ -Matrix, allerdings werden nun zwei ungerade Eigenfunktionen resultieren. Nach (3.25) hat die zugehörige stationäre Schrödingergleichung folgende Form:

$$\begin{aligned}
 & -a \begin{pmatrix} -3\mu & 6 \\ 4\nu & -7\mu \end{pmatrix} \cdot \vec{c} = E \vec{c} & \tilde{E} & := E/a \\
 \Leftrightarrow & -a \begin{pmatrix} -3\mu + \tilde{E} & 6 \\ 4\nu & -7\mu + \tilde{E} \end{pmatrix} \cdot \vec{c} = 0 & & (3.34)
 \end{aligned}$$

Wie zuvor bereits benutzt, ist die Gleichung lösbar, wenn die Determinante der Matrix gleich Null ist:

$$\begin{aligned}
 \text{Det}(\mathcal{M}) &= (-3\mu + \tilde{E})(-7\mu + \tilde{E}) - 24\nu \stackrel{!}{=} 0 \\
 \Leftrightarrow \tilde{E}^2 - 10\mu\tilde{E} + 21\mu^2 - 24\nu &= 0 \\
 \Rightarrow \tilde{E}_{\pm} &= 5\mu \pm \sqrt{4\mu^2 + 24\nu}
 \end{aligned} \tag{3.35}$$

Wiederum wurde die  $pq$ -Formel ( $p = -10\mu$ ,  $q = 21\mu^2 - 24\nu$ ) verwendet. Da  $\nu$  positiv ist, ergeben sich erneut zwei reelle Lösungen. Aus den selben Gründen wie für  $n = 2$  wird der Koeffizient  $c_0 = N$  gewählt und der zweite Koeffizient  $c_1$  über die erste Zeile aus (3.34) bestimmt:

$$\begin{aligned}
 0 &= -a \left[ \left( -3\mu + 5\mu \pm \sqrt{4\mu^2 + 24\nu} \right) c_0 + 6c_1 \right] & c_0 &= N \\
 \Leftrightarrow c_1 &= \frac{-N}{3} \left( \mu \pm \sqrt{\mu^2 + 6\nu} \right)
 \end{aligned} \tag{3.36}$$

Unter den Bedingungen  $\nu = A^{1/2}$   $\mu = B/(2A^{1/2})$  ergeben sich die beiden für  $n = 3$  bestimmbaren, energetisch niedrigsten, ungeraden, exakten Lösungen zu

$$\Psi_{u,0}(x) = N \left[ x - \frac{1}{3} \left( \mu - \sqrt{\mu^2 + 6\nu} \right) \cdot x^3 \right] e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4}, \tag{3.37}$$

$$\Psi_{u,1}(x) = N' \left[ x - \frac{1}{3} \left( \mu + \sqrt{\mu^2 + 6\nu} \right) \cdot x^3 \right] e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4}. \tag{3.38}$$

Die zugehörigen Eigenenergien lauten (siehe Gleichung (3.35)):

$$E_{u,0} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( 5\mu - 2\sqrt{\mu^2 + 6\nu} \right) \tag{3.39}$$

$$E_{u,1} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( 5\mu + 2\sqrt{\mu^2 + 6\nu} \right) \tag{3.40}$$

In Abbildung 2 sind  $\Psi_{u,0}$  und  $\Psi_{u,1}$  für ein Potenzial mit den Parametern  $A = 1$ ,  $B = -8$ ,  $C = 7$ ,  $\nu = 1$  und  $\mu = -4$  dargestellt. Das Nullniveau in  $y$ -Richtung wurde dabei wie zuvor auf die jeweilige Eigenenergie gelegt und die Wellenfunktionen analog zu  $n = 2$  normiert ( $N \approx 6,190 \cdot 10^{-3}$ ,  $N' \approx 3,550 \cdot 10^{-1}$ ).

### 3. SEXTISCHES POTENZIAL $V_6$

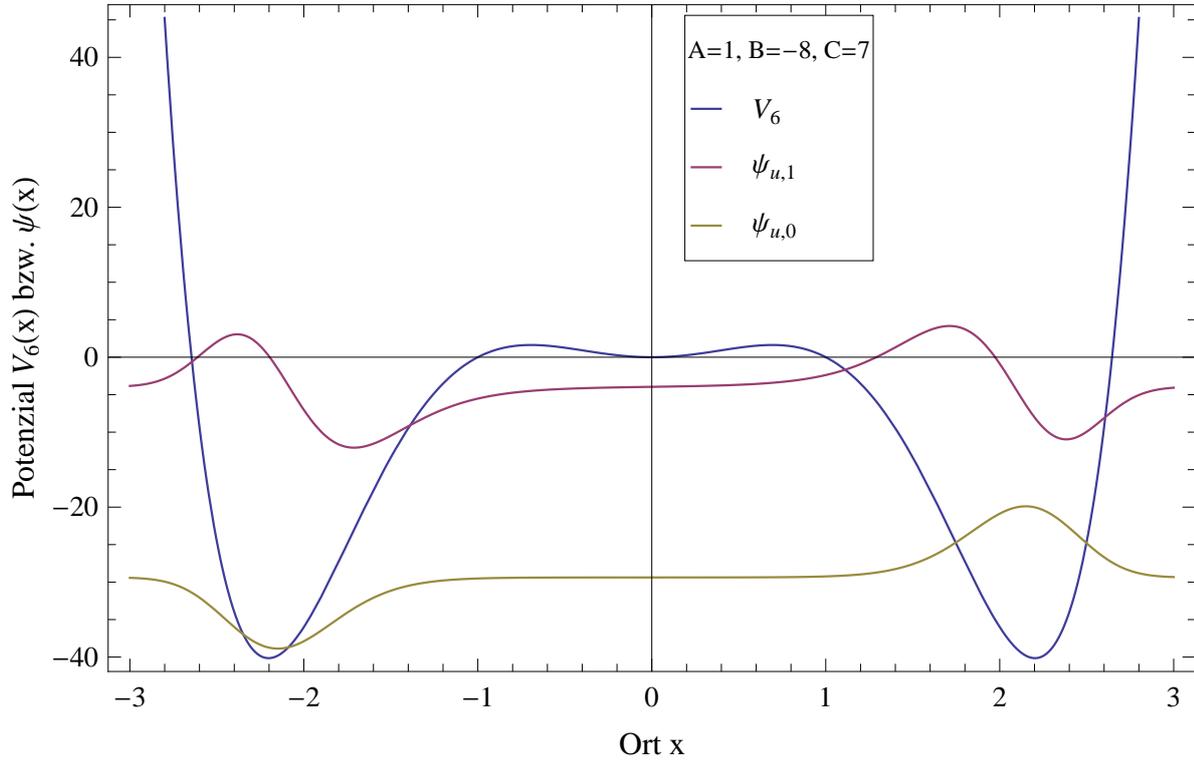


Abbildung 2: Sextisches Potenzial  $V_6(x)$  mit den Parametern  $A = 1$ ,  $B = -8$  und  $C = 7$ , aufgetragen gegen  $x$  (blau). Eingezeichnet sind die beiden für  $n = 3$  bestimmbaren, exakten Lösungen  $\Psi_{u,0}(x)$  und  $\Psi_{u,1}(x)$ . Das Nullniveau in  $y$ -Richtung wurde auf die jeweilige Eigenenergie gesetzt.

Für  $n = 4$  und  $n = 5$  hat der Hamiltonoperator die Form einer  $3 \times 3$ -Matrix, woraus eine Bestimmungsgleichung in dritter Potenz folgt.

$n = 4$

Für  $n = 4$  resultiert aus (3.24) die stationäre Schrödingergleichung:

$$\begin{aligned}
 & -a \begin{pmatrix} -\mu & 2 & 0 \\ 8\nu & -5\mu & 12 \\ 0 & 4\nu & -9\mu \end{pmatrix} \cdot \vec{c} = E \vec{c} \\
 \Leftrightarrow & -a \begin{pmatrix} -\mu + \tilde{E} & 2 & 0 \\ 8\nu & -5\mu + \tilde{E} & 12 \\ 0 & 4\nu & -9\mu + \tilde{E} \end{pmatrix} \cdot \vec{c} = 0 \quad (3.41)
 \end{aligned}$$

Diese Gleichung ist genau dann lösbar, wenn die Determinante der Matrix verschwindet:

$$\begin{aligned} \text{Det}(\mathcal{M}) &= (\tilde{E} - \mu)(\tilde{E} - 5\mu)(\tilde{E} - 9\mu) - 16\nu(\tilde{E} - 9\mu) - 48\nu(\tilde{E} - \mu) \\ &\Leftrightarrow \tilde{E}^3 - \underbrace{15\mu}_{b_1}\tilde{E}^2 + \underbrace{(59\mu^2 - 64\nu)}_{b_2}\tilde{E} - \underbrace{45\mu^3 + 192\mu\nu}_{b_3} = 0 \\ &\Leftrightarrow z^3 + pz + q = 0 \end{aligned}$$

Dabei wurde die Gleichung über die Substitutionen  $z = \tilde{E} + \frac{b_1}{3}$  in eine über die Cardanischen Formeln lösbare Form gebracht. Wie sich durch Einsetzen leicht zeigen lässt gilt dabei  $p = b_2 - \frac{b_1^2}{3} = -16(4\nu + \mu^2)$  und  $q = \frac{2b_1^3}{27} - \frac{b_1b_2}{3} + b_3 = -2^7\mu\nu$ . Zur Klassifikation der Lösungen dieser Gleichung wird die Diskriminante  $D$  bestimmt:

$$\begin{aligned} D &:= \left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3 \\ &= 2^{12}\mu^2\nu^2 - \frac{2^{12}}{27}(64\nu^3 + 48\mu^2\nu^2 + 12\mu^4\nu + \mu^6) \\ &= -2^{12}\left(\frac{64}{27}\nu^3 + \frac{7}{9}\mu^2\nu^2 + \frac{4}{9}\mu^4\nu + \frac{1}{27}\mu^6\right) < 0 \end{aligned} \quad (3.42)$$

Insbesondere ist  $\mu$  reell, sodass  $\mu^2 \geq 0$  und  $\nu > 0$ . Unter diesen Bedingungen ist die Diskriminante  $D$  stets negativ, was bedeutet, dass drei reelle Lösungen  $z_1$ ,  $z_2$  und  $z_3$  existieren. Aus diesen ergeben sich die gesuchten Eigenenergien zu:

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left( z_3 - \frac{b_1}{3} \right) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ 5\mu - \sqrt{\frac{-4}{3}}p \cdot \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \frac{-q}{2} \cdot \sqrt{\frac{-27}{p^3}} \right) - \frac{\pi}{3} \right) \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[ 5\mu - 8 \left( \frac{4\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(4\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) - \frac{\pi}{3} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.43)$$

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left( z_1 - \frac{b_1}{3} \right) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ 5\mu - \sqrt{\frac{-4}{3}}p \cdot \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \frac{-q}{2} \cdot \sqrt{\frac{-27}{p^3}} \right) + \frac{\pi}{3} \right) \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[ 5\mu - 8 \left( \frac{4\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(4\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) + \frac{\pi}{3} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.44)$$

$$\begin{aligned} E_2 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left( z_2 - \frac{b_1}{3} \right) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ 5\mu + \sqrt{\frac{-4}{3}}p \cdot \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \frac{-q}{2} \cdot \sqrt{\frac{-27}{p^3}} \right) \right) \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[ 5\mu + 8 \left( \frac{4\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(4\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (3.45)$$

### 3. SEXTISCHES POTENZIAL $V_6$

---

Mit diesen Eigenwerten können dann die Koeffizienten  $c_0$ ,  $c_1$  und  $c_2$  bestimmt werden. Wiederum wird dazu  $c_0 = N$  gewählt, sodass aus der ersten und dritten Zeile der stationären Schrödingergleichung (3.41) folgt:

$$\begin{aligned} (-\mu + \tilde{E}) c_0 + 2c_1 &= 0 & c_0 &= N \\ \Leftrightarrow c_1 &= N \frac{\mu - \tilde{E}}{2} \end{aligned} \quad (3.46)$$

$$\begin{aligned} 4\nu c_1 + (\tilde{E} - 9\mu) c_2 &= 0 \\ \Leftrightarrow c_2 &= N \frac{4\nu}{9\mu - \tilde{E}} \frac{\mu - \tilde{E}}{2} = N \frac{2\nu(\mu - \tilde{E})}{9\mu - \tilde{E}} \end{aligned} \quad (3.47)$$

Mit den Energien aus (3.43), (3.44) und (3.45) resultieren die drei Eigenfunktionen:

$$\begin{aligned} \Psi_{g,0}(x) &= N \left\{ 1 - \left[ 2\mu - 4 \left( \frac{4\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(4\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) - \frac{\pi}{3} \right) \right] x^2 \right. \\ &\quad \left. + \nu \frac{-2\mu + 4 \left( \frac{4\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(4\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) - \frac{\pi}{3} \right)}{\mu + 2 \left( \frac{4\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(4\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) - \frac{\pi}{3} \right)} x^4 \right\} e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4} \end{aligned} \quad (3.48)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{g,1}(x) &= N' \left\{ 1 - \left[ 2\mu - 4 \left( \frac{4\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(4\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) + \frac{\pi}{3} \right) \right] x^2 \right. \\ &\quad \left. + \nu \frac{-2\mu + 4 \left( \frac{4\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(4\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) + \frac{\pi}{3} \right)}{\mu + 2 \left( \frac{4\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(4\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) + \frac{\pi}{3} \right)} x^4 \right\} e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4} \end{aligned} \quad (3.49)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{g,2}(x) &= N'' \left\{ 1 - \left[ 2\mu + 4 \left( \frac{4\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(4\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) \right) \right] x^2 \right. \\ &\quad \left. - \nu \frac{2\mu + 4 \left( \frac{4\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(4\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) \right)}{\mu - 2 \left( \frac{4\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(4\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) \right)} x^4 \right\} \cdot e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4} \end{aligned} \quad (3.50)$$

Diese drei Eigenfunktion sind in Abbildung 3 für die Parameter  $A = 1$ ,  $B = -8$ ,  $C = 5$ ,  $\mu = -4$  und  $\nu = 1$  dargestellt. Das Nullniveau in  $y$ -Richtung ist dabei auf die jeweilige Eigenenergie gesetzt und die Wellenfunktionen auf die Gesamtaufenthaltswahrscheinlichkeit von 100 normiert ( $N \approx 3,00810^{-4}$ ,  $N' \approx 2,448 \cdot 10^{-2}$ ,  $N'' \approx 1,606$ ).

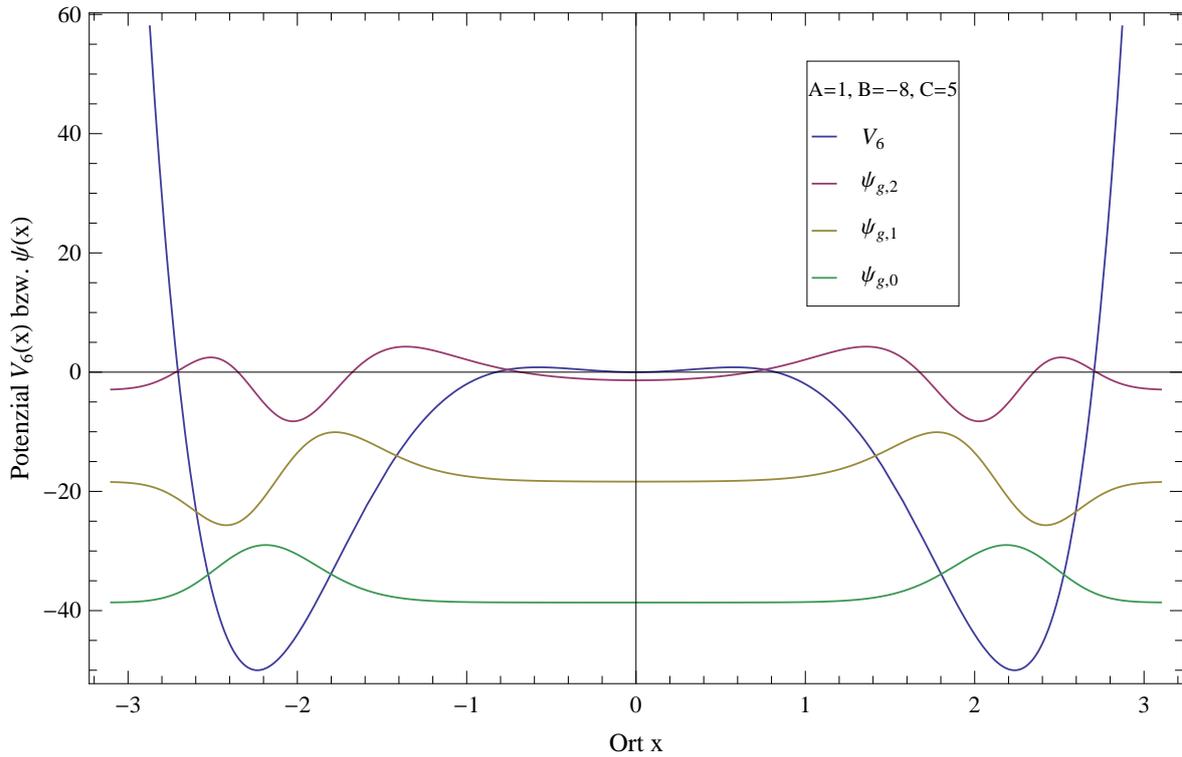


Abbildung 3: Sextisches Potenzial  $V_6(x)$  mit den Parametern  $A = 1$ ,  $B = -8$  und  $C = 5$ , aufgetragen gegen  $x$  (blau). Eingezeichnet sind die drei über  $n = 4$  bestimmbaren, exakten Lösungen  $\Psi_{g,0}(x)$ ,  $\Psi_{g,1}(x)$  und  $\Psi_{g,2}(x)$ . Das Nullniveau in  $y$ -Richtung wurde auf die jeweilige Eigenenergie gesetzt.

$$n = 5$$

Für  $n = 5$  resultiert aus (3.24) die stationäre Schrödingergleichung:

$$\begin{aligned}
 & -a \begin{pmatrix} -3\mu & 6 & 0 \\ 8\nu & -7\mu & 20 \\ 0 & 4\nu & -11\mu \end{pmatrix} \cdot \vec{c} = E \vec{c} \\
 \Leftrightarrow & -a \begin{pmatrix} -3\mu + \tilde{E} & 6 & 0 \\ 8\nu & -7\mu + \tilde{E} & 20 \\ 0 & 4\nu & -11\mu + \tilde{E} \end{pmatrix} \cdot \vec{c} = 0 \quad (3.51)
 \end{aligned}$$

### 3. SEXTISCHES POTENZIAL $V_6$

---

Diese Gleichung ist genau dann lösbar, wenn die Determinante der Matrix verschwindet:

$$\begin{aligned} \text{Det}(\mathcal{M}) &= (\tilde{E} - 3\mu)(\tilde{E} - 7\mu)(\tilde{E} - 11\mu) - 48\nu(\tilde{E} - 11\mu) - 80\nu(\tilde{E} - 3\mu) \\ &\Leftrightarrow \tilde{E}^3 - \underbrace{21\mu}_{b_1}\tilde{E}^2 + \underbrace{(131\mu^2 - 128\nu)}_{b_2}\tilde{E} - \underbrace{231\mu^3 + 768\mu\nu}_{b_3} = 0 \\ &\Leftrightarrow z^3 + pz + q = 0 \end{aligned}$$

Dabei wurde die Gleichung über die Substitutionen  $z = \tilde{E} + \frac{b_1}{3}$  mit in eine über die Cardanischen Formeln lösbare Form gebracht. Wie sich leicht durch Einsetzen und Ausmultiplizieren zeigen lässt, gilt dabei  $p = b_2 - \frac{b_1^2}{3} = 131\mu^2 - 128\nu - \frac{21^2}{3}\mu^2 = -16(\mu^2 + 8\nu)$  und  $q = \frac{2b_1^3}{27} - \frac{b_1b_2}{3} + b_3 = -2^7\mu\nu$ . Zur Klassifikation der Lösungen dieser Gleichung wird die Diskriminante  $D$  bestimmt:

$$\begin{aligned} D &:= \left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3 \\ &= 2^{12}\mu^2\nu^2 - \frac{2^{12}}{27}(2^9\nu^3 + 192\mu^2\nu^2 + 24\mu\nu^4 + \mu^6) \\ &= -2^{12}\left(\frac{2^9}{27}\nu^3 + \frac{55}{9}\mu^2\nu^2 + \frac{8}{9}\mu^4\nu + \frac{1}{27}\mu^6\right) < 0 \end{aligned} \quad (3.52)$$

Insbesondere ist  $\mu^2 \geq 0$  und  $\nu > 0$ . Unter diesen Bedingungen ist die Diskriminante  $D$  stets negativ, was bedeutet, dass drei reelle Lösungen  $z_1$ ,  $z_2$  und  $z_3$  existieren. Aus diesen ergeben sich die gesuchten Eigenenergien zu:

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(z_3 - \frac{b_1}{3}\right) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[7\mu - \sqrt{\frac{-4}{3}}p \cdot \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(\frac{-q}{2} \cdot \sqrt{\frac{-27}{p^3}}\right) - \frac{\pi}{3}\right)\right] \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[7\mu - 8\left(\frac{8\nu + \mu^2}{3}\right)^{1/2} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(\sqrt{27}\mu\nu(8\nu + \mu^2)^{-3/2}\right) - \frac{\pi}{3}\right)\right] \end{aligned} \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(z_1 - \frac{b_1}{3}\right) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[7\mu - \sqrt{\frac{-4}{3}}p \cdot \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(\frac{-q}{2} \cdot \sqrt{\frac{-27}{p^3}}\right) + \frac{\pi}{3}\right)\right] \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[7\mu - 8\left(\frac{8\nu + \mu^2}{3}\right)^{1/2} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(\sqrt{27}\mu\nu(8\nu + \mu^2)^{-3/2}\right) + \frac{\pi}{3}\right)\right] \end{aligned} \quad (3.54)$$

$$\begin{aligned} E_2 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(z_2 - \frac{b_1}{3}\right) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[7\mu + \sqrt{\frac{-4}{3}}p \cdot \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(\frac{-q}{2} \cdot \sqrt{\frac{-27}{p^3}}\right)\right)\right] \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[7\mu + 8\left(\frac{8\nu + \mu^2}{3}\right)^{1/2} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(\sqrt{27}\mu\nu(8\nu + \mu^2)^{-3/2}\right)\right)\right] \end{aligned} \quad (3.55)$$

Mit diesen Eigenwerten können dann die Koeffizienten  $c_0$ ,  $c_1$  und  $c_2$  bestimmt werden. Wiederum wird dazu  $c_0 = N$  gewählt, sodass aus der ersten und dritten Zeile der stationären Schrödingergleichung (3.51) folgt:

$$\begin{aligned} (-3\mu + \tilde{E})c_0 + 6c_1 &= 0 & c_0 &= N \\ \Leftrightarrow c_1 &= N \frac{3\mu - \tilde{E}}{6} \end{aligned} \quad (3.56)$$

$$\begin{aligned} 4\nu c_1 + (\tilde{E} - 11\mu)c_2 &= 0 \\ \Leftrightarrow c_2 &= N \frac{4\nu}{11\mu - \tilde{E}} c_1 = N \frac{2\nu}{3} \cdot \frac{3\mu - \tilde{E}}{11\mu - \tilde{E}}. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Mit den Energien aus (3.55), (3.54) und (3.53) resultieren drei Eigenfunktionen:

$$\begin{aligned} \Psi_{u,0}(x) &= N'' \left\{ x - \left[ \frac{2}{3}\mu - \frac{4}{3} \left( \frac{8\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(8\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) - \frac{\pi}{3} \right) \right] x^3 \right. \\ &\quad \left. + \frac{\nu}{3} \cdot \frac{-2\mu + 4 \left( \frac{8\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(8\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) - \frac{\pi}{3} \right)}{\mu + 2 \left( \frac{8\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(8\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) - \frac{\pi}{3} \right)} x^5 \right\} e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^5} \end{aligned} \quad (3.58)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{u,1}(x) &= N' \left\{ x - \left[ \frac{2}{3}\mu - \frac{4}{3} \left( \frac{8\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(8\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) + \frac{\pi}{3} \right) \right] x^3 \right. \\ &\quad \left. + \frac{\nu}{3} \cdot \frac{-2\mu + 4 \left( \frac{8\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(8\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) + \frac{\pi}{3} \right)}{\mu + 2 \left( \frac{8\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(8\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) + \frac{\pi}{3} \right)} x^5 \right\} e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^5} \end{aligned} \quad (3.59)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{u,2}(x) &= N \left\{ x - \left[ \frac{2}{3}\mu + \frac{4}{3} \left( \frac{8\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(8\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) \right) \right] x^3 \right. \\ &\quad \left. - \frac{\nu}{3} \cdot \frac{2\mu + 4 \left( \frac{8\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(8\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) \right)}{\mu - 2 \left( \frac{8\nu + \mu^2}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \sqrt{27}\mu\nu(8\nu + \mu^2)^{-3/2} \right) \right)} x^5 \right\} \cdot e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4} \end{aligned} \quad (3.60)$$

Diese drei Eigenfunktion sind in Abbildung 4 für die Parameter  $A = 1$ ,  $B = -8$ ,  $C = 5$ ,  $\mu = -4$  und  $\nu = 1$  dargestellt. Das Nullniveau in  $y$ -Richtung ist dabei auf die jeweilige Eigenenergie gesetzt und die Wellenfunktionen auf die Gesamtaufenthaltswahrscheinlichkeit von 100 normiert ( $N \approx 1,041$ ,  $N' \approx 3,291 \cdot 10^{-2}$ ,  $N'' \approx 5,899 \cdot 10^{-4}$ ).

### 3. SEXTISCHES POTENZIAL $V_6$

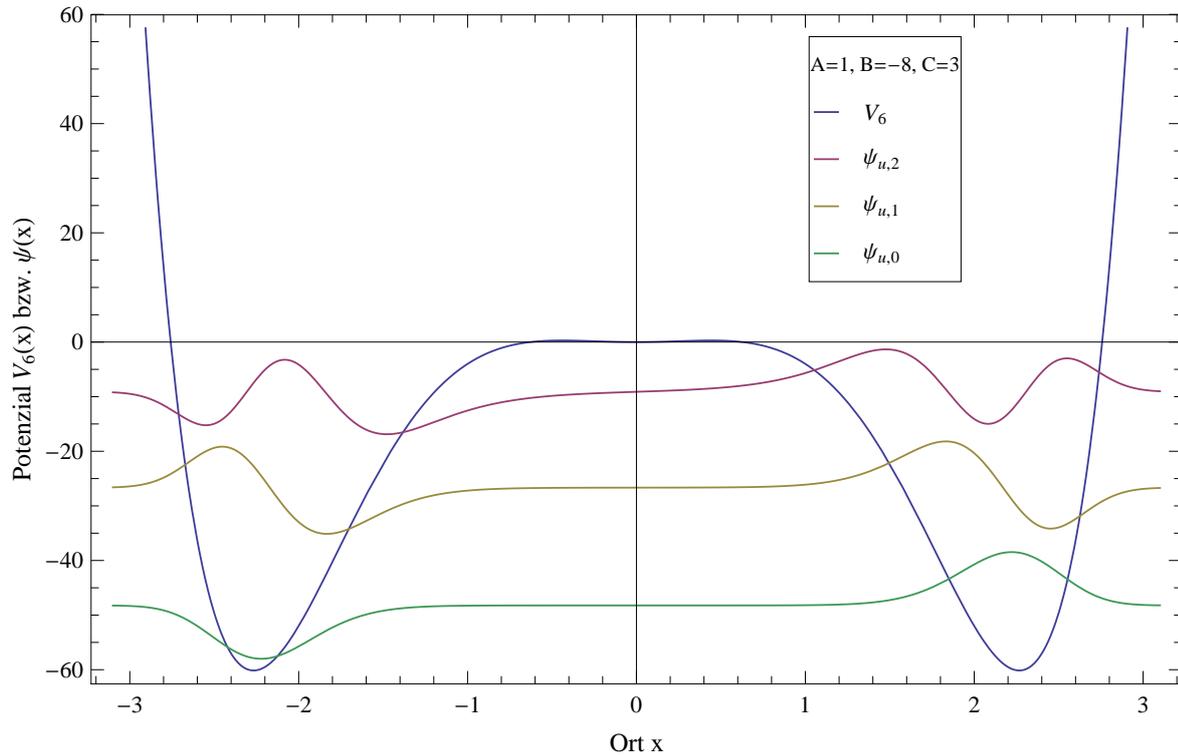


Abbildung 4: Sextisches Potenzial  $V_6(x)$  mit den Parametern  $A = 1$ ,  $B = -8$  und  $C = 3$ , aufgetragen gegen  $x$  (blau). Eingezeichnet sind die drei über  $n = 5$  bestimmbaren, exakten Lösungen  $\Psi_{u,0}(x)$ ,  $\Psi_{u,1}(x)$  und  $\Psi_{u,2}(x)$ . Das Nullniveau in  $y$ -Richtung wurde auf die jeweilige Eigenenergie gesetzt.

#### 3.4 Gestalt des Potenzials

Um die Anzahl der im Potenzialverlauf auftretenden Mulden klassifizieren zu können, wird nun die Gestalt des beschriebenen Potenzials  $V_6(x) = Ax^6 + Bx^4 + Cx^2$  analysiert. Im Potenzialterm treten ausschließlich gerade Potenzen von  $x$  auf, so dass das gesamte Potenzial symmetrisch bezüglich  $x = 0$  ist. Die prinzipielle Form wird dabei durch den führenden sextischen Term bestimmt. Da in der vorliegenden Arbeit Eigenlösungen des sextischen Muldenpotenzials gesucht werden, sollen im Folgenden die Bedingungen aus Abschnitt 3.1 gelten, insbesondere  $A > 0$ . Zusätzlich wird auch  $A = 0$  betrachtet, was gleichzeitig einem Spezialfall des anschließend betrachteten quartischen Potenzials entspricht. In Abhängigkeit der Koeffizienten  $A$ ,  $B$ ,  $C$  wird ein Potenzial mit einer, zwei oder drei Mulden resultieren (im Folgenden mit einfach-, zweifach- bzw. dreifach-Muldenpotenzial bezeichnet). Für  $A = 0$  und  $B > 0$  resultiert ein einfach- oder zweifach-Muldenpotenzial, während für  $A < 0$  ein Potenzialwall resultiert.

Zur genaueren Klassifizierung wird die Anzahl und Art der Extrema des Potentials untersucht. Die Bestimmung der Lage  $x_e$  der Extrema ist mit Hilfe der Ableitungen  $V_6', V_6'', \dots$  des Potentials nach  $x$  möglich. Die im Weiteren häufig verwendeten Ableitungen ergeben sich zu

$$V_6'(x) = 6Ax^5 + 4Bx^3 + 2Cx, \quad (3.61)$$

$$V_6''(x) = 30Ax^4 + 12Bx^2 + 2C \quad (3.62)$$

$$V_6'''(x) = 120Ax^3 + 24Bx. \quad (3.63)$$

Damit lassen sich die bekannten Extremalbedingungen lösen.

$$\text{notwendige Bedingung:} \quad V_6'(x_e) = V_6''(x_e) = \dots = V_6^{(2k+1)}(x_e) = 0 \quad (3.64)$$

$$\text{hinreichende Bedingung:} \quad V_6^{(2k+2)}(x_e) \neq 0, \quad k \in \mathbb{N}_0 \quad (3.65)$$

Über das Vorzeichen der  $(2k + 2)$ -ten Ableitung lässt sich dabei auch die Art eines Extremums bestimmen. Hier wird die Art der Extrema allerdings überwiegend aus ihrer Anzahl und der Muldenform abgeleitet werden.

Die notwendige Bedingung (3.64) für ein Extremum in  $x_e$  liefert mit (3.61)

$$\begin{aligned} V_6'(x_e) &= 6Ax_e^5 + 4Bx_e^3 + 2Cx_e = 0 \\ \Leftrightarrow 6Ax_e^4 + 4Bx_e^2 + 2C &= 0 \quad \wedge \quad x_{e,0} = 0 \end{aligned} \quad (3.66)$$

Offenbar ergibt sich unabhängig der Koeffizienten des Potentials ein mögliches Extremum bei  $x = 0$  sowie weitere mögliche Extrema in Abhängigkeit von  $A, B, C$  gemäß obiger Gleichung. Aus der Symmetrie bezüglich  $x = 0$  folgt, dass sich (da  $V \neq \text{const.} = 0$ ) bei  $x = 0$  tatsächlich ein Extremum befindet, dessen Art durch die Koeffizienten des Potentials bestimmt wird.

Für  $A = 0, B = 0, C > 0$  ist  $x = 0$  die einzige Lösung dieser Gleichung, während für  $A = 0, B > 0, C < 0$  zwei weitere Extrema folgen bei

$$x_e = \pm \sqrt{\frac{-C}{2B}}.$$

Für  $A = 0, B < 0$  resultiert ein Potenzialwall. Für  $A > 0$  wird die Substitution  $z := x^2$  eingeführt, sodass (3.66) im ersten Fall in eine Bestimmungsgleichung quadratisch

in  $z$  überführt wird. Diese lässt sich problemlos lösen.

$$\begin{aligned}
 6Az_e^2 + 4Bz_e + 2C &= 0 \\
 \Leftrightarrow z_e^2 + \frac{2B}{3A}z_e + \frac{C}{3A} &= 0 && |pq\text{-Formel mit } p = \frac{2B}{3A}, q = \frac{C}{3A} \\
 \Rightarrow z_{\pm} &= \frac{-p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} - q} \\
 &= \underbrace{\frac{-B}{3A}}_{:=P} \pm \sqrt{\frac{B^2}{9A^2} - \frac{C}{3A}}_{:=W} && (3.67)
 \end{aligned}$$

Der Übersichtlichkeit halber werden im Weiteren obige Kurzschreibweisen verwendet:  $P := -B/(3A)$  und  $W := \sqrt{B^2/(9A^2) - C/(3A)}$ . Insbesondere ist  $W$  reell für  $C \leq \frac{B^2}{3A}$ . Ist dies nicht der Fall, so sind beide Lösungen  $z_e$  imaginär, sodass  $x = 0$  das einzige Extremum ist und ein einfach-Muldenpotenzial vorliegt.

Nun kann ausgenutzt werden, dass  $z = x^2 \geq 0$  und  $z \in \mathbb{R}$  gelten muss, da  $x$  reell ist. In Abhängigkeit der Koeffizienten  $A, B, C$  wird dies für keine, eine oder zwei Lösungen  $z_{\pm}$  erfüllt, sodass sich wegen  $x = \pm\sqrt{z}$  zusätzlich zu dem Extremum in  $x = 0$  kein, zwei oder vier Extrema ergeben können. Dies entspricht dann einer, zwei oder drei Mulden im Potenzialverlauf mit jeweils einem Maximum zwischen zwei benachbarten Mulden.

Bei der nun folgenden Klassifizierung sei  $W$  reell, d.h.  $C \leq \frac{B^2}{3A}$ . Insbesondere ist dies unter den zuvor hergeleiteten Lösbarkeitsbedingungen (3.15) der Fall, wie sich leicht zeigen lässt:

$$\begin{aligned}
 \frac{B^2}{9A^2} - \frac{C}{3A} &= \frac{1}{9A^2} (B^2 - 3AC) = \frac{1}{3A} \left( B^2 - \frac{3}{4} (B^2 - 4(3+2n)A^{1/2}) \right) \\
 &= \frac{1}{6A} (B^2 + 12(3+2n)A^{1/2}) > 0 && (3.68)
 \end{aligned}$$

### Dreifach-Muldenpotenzial

Ein Potenzialverlauf mit drei Mulden kann dann auftreten, wenn beide Lösungen für  $z_{\pm}$  positiv und reell sind. Dazu ist es zusätzlich notwendig, dass:

- (i)  $P > W$ , damit  $z_+, z_- > 0$ , insbesondere  $P > 0$

Aus  $P = -B/(3A) > 0$  direkt  $B < 0$ . Wie man (3.67) entnehmen kann, ist (i) damit äquivalent zu  $-B > \sqrt{B^2 - 3AC}$ . Dies führt dann direkt zu  $C > 0$ . Um das hinreichende Kriterium für ein Extremum in  $z_e$  zu überprüfen, betrachte man die Gestalt des Potenzials. Für  $x = 0$  ergibt sich mit  $C > 0$ :

$$V_6''(0) = 2C > 0$$

Das Potenzial hat bei  $x = 0$  also ein Minimum. Da das Potenzial mit  $A > 0$  als muldenförmig vorausgesetzt wurde, kann es entweder ein einzelnes Minimum bei  $x = 0$  besitzen oder insgesamt fünf Extrema mit drei Minima aufweisen. Das Auftreten von nur zwei weiteren Extrema ist nicht möglich. Nun betrachte man die zweite Ableitung an den zuvor berechneten Stellen  $z_{\pm}$ :

$$\begin{aligned} V_6''(z_e) &= 30A \cdot \left( \frac{-B}{3A} \pm \sqrt{\frac{B^2}{9A^2} - \frac{C}{3A}} \right)^2 \\ &\quad + 12B \left( \frac{-B}{3A} \pm \sqrt{\frac{B^2}{9A^2} - \frac{C}{3A}} \right) + 2C \\ &= \frac{8B^2}{3A} \mp \frac{8B}{3A} \sqrt{B^2 - 3AC} - 8C \end{aligned}$$

Damit dieser Term für beide Fälle (+/-) Null ergibt, muss aber gelten:

$$\frac{8B}{3A} \sqrt{B^2 - 3AC} = 0 \quad (3.69)$$

Wegen  $B < 0$  ist dies nur möglich, wenn  $B^2 = 3AC$  ist. In diesem Fall ist aber  $z_- = z_+$ , sodass kein dreifach-Muldenpotenzial resultieren kann. Für  $B^2 > 3AC$  ist obige Gleichung nicht erfüllt, sodass es sich bei allen fünf möglichen Extrema tatsächlich um Extrema handeln muss. Ein dreifach-Muldenpotenzial entspricht also dem Fall

$$A > 0 \wedge B < 0 \wedge 0 < C < \frac{B^2}{3A}. \quad (3.70)$$

### Zweifach-Muldenpotenzial

Ein Potenzialverlauf mit zwei Mulden kann hingegen dann auftreten, wenn genau eine Lösung für  $z_e$  reell und positiv ist. Hierfür existieren zwei Möglichkeiten:

- (i)  $z_+ = z_- = P > 0$ , d.h.  $W = 0$ ,
- (ii)  $z_- \leq 0$ ,  $z_+ > 0$  oder genau umgekehrt, d.h.  $W \geq |P| \Leftrightarrow W^2 \geq P^2$ , wobei die Gleichheit nur für  $P > 0$  zulässig ist (sonst ergibt sich ein  $z_e < 0$  und ein  $z_e = 0$ )

(i) führt wegen  $P > 0$  direkt auf  $B < 0$  und dann mit  $W = 0$  auf die Bedingung:

$$\begin{aligned} \frac{1}{3A} \sqrt{B^2 - 3AC} &= 0 \\ \Leftrightarrow C &= \frac{B^2}{3A} > 0 \end{aligned}$$

Jedoch handelt es sich bei dem Extremum in  $x = 0$  wegen

$$V_6''(0) = 2C > 0$$

um ein Minimum. Aus der Symmetrie des Potenzials folgt sofort, dass in diesem Fall genau zwei Mulden ebenso wie zuvor genau drei Mulden ausgeschlossen sind.

(ii) liefert hingegen einschränkende Ungleichungen für die Koeffizienten. Im Falle der Gleichheit folgt wegen  $P > 0$  direkt  $B < 0$  und aus  $W = \sqrt{\frac{B^2}{9A^2} - \frac{C}{3A}} = \frac{-B}{3A} = P$  direkt, dass  $C = 0$ . Im Falle der Ungleichheit ergibt sich:

$$\begin{aligned} & W^2 > P^2 \\ \Leftrightarrow & \frac{B^2}{9A^2} - \frac{C}{3A} > \frac{B^2}{9A^2} \\ \Leftrightarrow & C < 0 \end{aligned}$$

Für  $C < 0$  handelt es sich bei  $x = 0$  wegen

$$V_6''(0) = 2C < 0$$

um ein Maximum. Für den Fall  $C = 0$ ,  $B < 0$  liefern die weiteren Ableitungen des Potenzials:

$$V_6''(0) = V_6'''(0) = 0, \quad V_6^{(4)} = 24B < 0$$

Es handelt sich also in beiden Fällen um ein Maximum in  $x = 0$ . Für Funktionen ohne Singularitäten oder Sprünge wechseln sich Minima und Maxima stets ab. Da maximal vier weitere Extrema existieren und die Grundform einer Mulde vorgegeben wurde ( $A > 0$ ), muss es sich für  $C < 0$  um ein zweifach-Muldenpotenzial mit zwei weiteren Minima handeln.

Unter Berücksichtigung des zuvor betrachteten Falls  $A = 0$  tritt ein zweifach-Muldenpotenzial also auf, für

$$A = 0 \wedge B > 0 \wedge C < 0, \quad A > 0 \wedge C < 0, \quad A > 0 \wedge B < 0 \wedge C = 0. \quad (3.71)$$

### Einfach-Muldenpotenzial

Ein einfach-Muldenpotenzial ergibt sich in allen übrigen Fällen, da  $A > 0$  zur Existenz mindestens einer Mulde führt. Zur Überprüfung seien aber die nötigen Bedingungen aufgezeigt. Ein einfach-Muldenpotenzial entspricht ausschließlich negativen oder imaginären Lösungen für  $z_{\pm}$ . Imaginäre Lösungen treten für

$$C > B^2/(3A)$$

auf. Für ausschließlich negative Lösungen  $z_{\pm}$  folgen die Bedingungen

$$P \leq 0 \text{ und } W \leq |P| \Leftrightarrow W^2 \leq P^2.$$

$P \leq 0$  führt direkt auf  $B \geq 0$ . Die zweite Bedingung liefert:

$$\begin{aligned} & W^2 \leq P^2 \\ \Leftrightarrow & \frac{B^2}{9A^2} - \frac{C}{3A} \leq \frac{B^2}{9A^2} \\ \Leftrightarrow & C \geq 0 \end{aligned}$$

Ein einfach-Muldenpotenzial resultiert mit den zuvor betrachteten Fällen für

$$\begin{aligned} & A = 0 \wedge B = 0 \wedge C > 0, \quad A = 0 \wedge B > 0 \wedge C > 0, \\ & A > 0 \wedge B \geq 0 \wedge C \geq 0, \quad A > 0 \wedge C \geq B^2/(3A). \end{aligned} \quad (3.72)$$

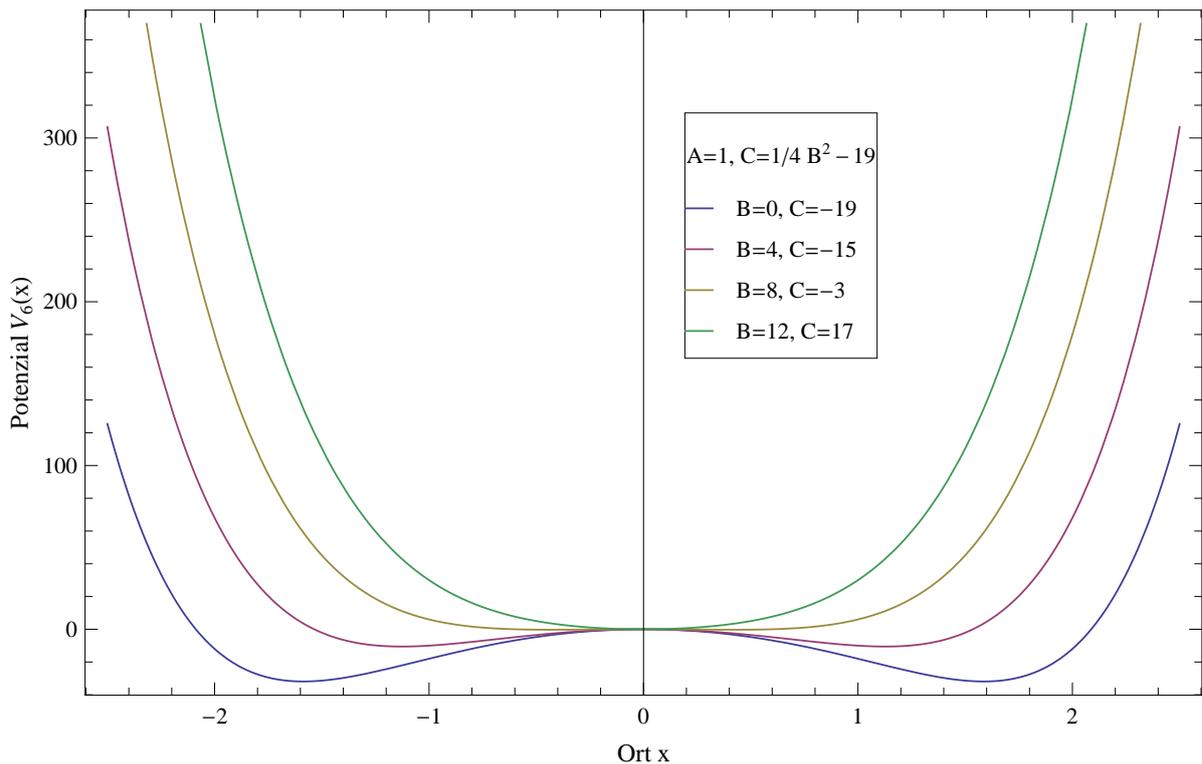


Abbildung 5: Sextisches Potenzial  $V_6(x)$  aufgetragen gegen  $x$  für verschiedene Parameter  $B \geq 0$  mit  $A = 1$  und  $C = B^2/(3A) - (2n + 3)$  bei  $n = 8$

Die Ergebnisse dieser Betrachtungen sind in den Tabellen 1 und 2 zusammengefasst. Abbildungen 5 und 6 zeigen Potenzialverläufe für  $A = 1$  und verschiedene  $B < 0$  bzw.  $B \geq 0$ . Die Parameter erfüllen dabei die Lösbarkeitsbedingungen.

### 3. SEXTISCHES POTENZIAL $V_6$

---

	$B = 0$	$B > 0$
$C < 0$	–	2
$C = 0$	–	1
$C > 0$	1	1

Tabelle 1: Anzahl der im sextischen Potenzial auftretenden Mulden in Abhängigkeit der Parameter  $B$  und  $C$  für  $A = 0$

	$B < 0$	$B \geq 0$
$C < 0$	2	2
$C = 0$	2	1
$B^2/(3A) > C > 0$	3	1
$C \geq B^2/(3A)$	1	1

Tabelle 2: Anzahl der im sextischen Potenzial auftretenden Mulden in Abhängigkeit der Parameter  $B$  und  $C$  für  $A > 0$ . Der Fall  $C \geq B^2/(3A)$  ist nicht mit den Lösbarkeitsbedingungen vereinbar.

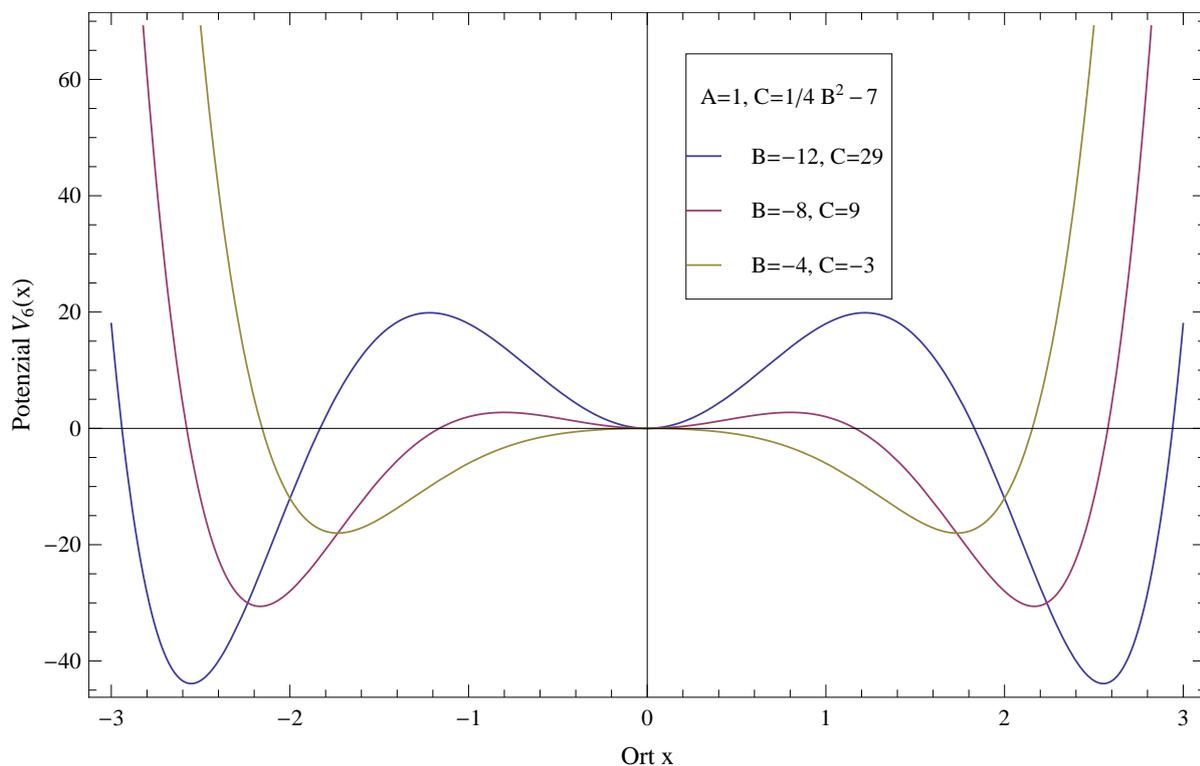


Abbildung 6: Sextisches Potenzial  $V_6(x)$  aufgetragen gegen  $x$  für verschiedene Parameter  $B < 0$  mit  $A = 1$  und  $C = B^2/(3A) - (2n + 3)$  bei  $n = 2$

## 4 Quartisches Potenzial $V_4$

Im nun folgenden Teil werden die zuvor für das sextische Potenzial durchgeführten Schritte auf das quartische Potenzial

$$V_4 = A \cdot x^4 + B \cdot x^3 + C \cdot x^2 + D \cdot x \quad (4.1)$$

$$=: \frac{\hbar^2}{2m} (\tilde{A} \cdot x^4 + \tilde{B} \cdot x^3 + \tilde{C} \cdot x^2 + \tilde{D} \cdot x) \quad (4.2)$$

angewandt, um energetisch niedrig liegende Eigenfunktionen des Potenzials zu konstruieren.  $A =: \hbar^2 \tilde{A}/(2m)$ ,  $B =: \hbar^2 \tilde{B}/(2m)$ ,  $C =: \hbar^2 \tilde{C}/(2m)$  und  $D =: \hbar^2 \tilde{D}/(2m)$  sind wiederum reellwertige Parameter, wie sich im Lauf der Rechnung begründen wird. Auch zu diesem quartischen Potenzial lässt sich die stationäre Schrödingergleichung

$$\left( \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_4(x) \right) \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (4.3)$$

auf analytischem Wege nicht allgemein exakt lösen. Wie in Abschnitt 2 erläutert, haben die Eigenlösungen  $\Psi(x)$  für dieses Potenzial die Form

$$\Psi(x) = p(x) \cdot \exp \left[ -\lambda x - \frac{\mu}{2} x^2 - \frac{\nu}{3} x^3 \right], \quad (4.4)$$

mit  $p(x)$  einem Polynom in  $x$  und drei Parametern  $\lambda$ ,  $\mu$ ,  $\nu$ . Der Term dritten Grades in der Exponentialfunktion wird sich später als kritisch für die Normierbarkeit der Eigenfunktionen herausstellen. Als Basisfunktionen dienen dann durch  $k = 0, 1, \dots, n$  parametrisierte Funktionen  $f_k(x)$ :

$$f_k(x) = x^k \cdot \exp \left[ -\lambda x - \frac{\mu}{2} x^2 - \frac{\nu}{3} x^3 \right] \quad (4.5)$$

Zunächst sind die algebraischen Lösbarkeitsbedingungen an die Koeffizienten  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$ ,  $\lambda$ ,  $\mu$  und  $\nu$  zu bestimmen. Das dazu verwendete Vorgehen ist das gleiche wie für das sextische Potenzial, sodass die Erläuterungen einiger Teilschritte nur komprimiert wiederholt werden.

Ähnlich wie beim sextischen Potenzial soll erneut ein muldenförmiges Potenzial betrachtet werden. Dies führt auf die Bedingung  $A > 0$ , sodass das Potenzial für große positive wie große negative  $x$  gegen  $+\infty$  strebt.

### 4.1 Basisfunktionen und Lösbarkeitsbedingungen

Zunächst wird die Wirkung des Hamiltonoperators auf die Basisfunktionen bestimmt:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}f_k(x) &= \left( \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_4(x) \right) x^k \cdot e^{-\lambda x - \frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{3}x^3} & a &:= \frac{\hbar^2}{2m} \\
 &= -a \frac{\partial}{\partial x} \left[ kx^{k-1} - \left( \lambda + \mu x + \nu x^2 \right) x^k \right] \cdot e^{-\lambda x - \frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{3}x^3} + V_4(x) f_k(x) \\
 &= -a \left[ k(k-1)x^{k-2} - kx^{k-1} \left( \lambda + \mu x + \nu x^2 \right) - x^k (\mu + 2\nu x) \right. \\
 &\quad \left. - kx^{k-1} \left( \lambda + \mu x + \nu x^2 \right) + x^k \left( \lambda + \mu x + \nu x^2 \right)^2 \right] \cdot e^{-\lambda x - \frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{3}x^3} \\
 &\quad + V_4(x) f_k(x) \\
 &= -a \left[ k(k-1)x^{k-2} - 2k \left( \lambda x^{k-1} + \mu x^k + \nu x^{k+1} \right) - \left( \mu x^k + 2\nu x^{k+1} \right) \right. \\
 &\quad \left. + \lambda^2 x^k + \mu^2 x^{k+2} + \nu^2 x^{k+4} + 2\lambda \mu x^{k+1} + 2\lambda \nu x^{k+2} + 2\mu \nu x^{k+3} \right] \\
 &\quad \cdot e^{-\lambda x - \frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{3}x^3} + V_4(x) f_k(x) \\
 &= -a \left[ k(k-1)x^{k-2} - 2k\lambda x^{k-1} + \left( \lambda^2 - (2k+1)\mu \right) x^k \right. \\
 &\quad \left. + \left( 2\lambda\mu - 2\nu(k+1) - \tilde{D} \right) x^{k+1} + \left( \mu^2 + 2\lambda\nu - \tilde{C} \right) x^{k+2} \right. \\
 &\quad \left. + \left( 2\mu\nu - \tilde{B} \right) x^{k+3} + \left( \nu^2 - \tilde{A} \right) x^{k+4} \right] e^{-\lambda x - \frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{3}x^3} \tag{4.6}
 \end{aligned}$$

In Gleichung (4.6) treten nun sowohl gerade, als auch ungerade Potenzen von  $x$  auf. Insbesondere treten auch vier Terme auf, deren Potenz  $k$  übersteigt, nämlich in den Potenzen  $k+1$ ,  $k+2$ ,  $k+3$  und  $k+4$ . Das Vorgehen ist hier analog zum sextischen Potenzial. Terme, deren Potenz die maximal in einer Basisfunktion auftretende Potenz  $n$  übersteigt, müssen entweder durch Beiträge anderer Basisfunktionen kompensiert werden oder sich direkt zu Null ergeben. Da aus der Basisfunktion  $f_n(x)$  ein Term  $\propto x^{n+4}$  resultiert, der nicht über Basisfunktionen mit  $k < n$  erzeugt werden kann, muss gelten:

$$\tilde{A} = \nu^2 \tag{4.7}$$

Da der zu Null gewählte Koeffizient unabhängig von  $k$  ist, liefert auch  $f_{n-1}$  keinen Beitrag in  $(n+3)$ -ter Potenz. Folglich muss auch der Koeffizient des Terms  $\propto x^{k+3}$  für den Fall  $k = n$  Null ergeben. Hieraus folgt direkt:

$$\tilde{B} = 2\mu\nu \tag{4.8}$$

Der Koeffizient des Terms  $\propto x^{k+3}$  ist ebenfalls unabhängig von  $k$  zu Null gewählt, sodass auch der Term  $\propto x^{k+2}$  für  $k = n$  nicht über andere Basisfunktionen kompen-

siert werden kann. Daher muss auch der Koeffizient dieses Terms Null ergeben:

$$\tilde{C} = \mu^2 + 2\lambda\nu \quad (4.9)$$

Da auch dieser Koeffizient unabhängig von  $k$  ist, muss ebenfalls der Koeffizient des Terms  $\propto x^{k+1}$  für  $k = n$  Null ergeben:

$$\tilde{D} = 2\lambda\mu - 2\nu(n + 1) \quad (4.10)$$

Alle Terme mit kritischer Potenz wurden nun ausgewertet, sodass unter den Lösbarkeitsbedingungen (4.7), (4.8), (4.9) und (4.10) exakte Lösungen für das Potenzial  $V_4(x)$  aus den Basisfunktionen  $f_k$  konstruiert werden können. Insbesondere ist der zuletzt für  $k = n$  zu Null gewählte Koeffizient von  $k$  abhängig. Alle Basisfunktionen mit  $k < n$  liefern weiterhin Beiträge in  $(k - 2)$ -ter,  $(k - 1)$ -ter,  $k$ -ter und  $(k + 1)$ -ter Potenz, wobei sich die Vorfaktoren zu Beiträgen negativer Potenzen zu Null ergeben. Im Unterschied zum sextischen Potenzial können hier alle Potenzen mischen, da die Basisfunktion  $f_{n-1}$  nicht zu Beiträgen in Potenzen größer  $n$  führt.

Unter den oben hergeleiteten Lösbarkeitsbedingungen vereinfacht sich (4.6) zu:

$$\begin{aligned} Hf_k(x) = & -a \left( k(k-1)x^{k-2} - 2k\lambda x^{k-1} + (\lambda^2 - (2k+1)\mu) x^k \right. \\ & \left. + 2\nu(n-k)x^{k+1} \right) e^{-\lambda x - \frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{3}x^3}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Die quasi-exakt lösbaren quartischen Potenziale haben dann die Form:

$$V_4(x) = \nu^2 x^4 + 2\mu\nu x^3 + (\mu^2 + 2\lambda\nu) x^2 + (2\lambda\mu - \nu(n+1))x \quad (4.12)$$

Für  $A > 0$  lässt sich (4.9) nach  $\lambda$  und (4.8) nach  $\mu$  umformen. Setzt man dies mit  $\nu = \pm A^{1/2}$  aus (4.7) in (4.10) ein, so ergibt sich die algebraische Lösbarkeitsbedingung:

$$\begin{aligned} \tilde{D} &= \frac{\tilde{C} - \mu^2}{\nu} \mu - 2\nu(n+1) \\ &= \frac{\tilde{C} - \frac{\tilde{B}^2}{4\nu^2}}{\nu} \frac{\tilde{B}}{2\nu} - 2\nu(n+1) \\ &= \frac{\tilde{C}\tilde{B}}{2\tilde{A}} - \frac{\tilde{B}^3}{8\tilde{A}^2} \pm 2\tilde{A}^{1/2}(n+1) \\ \Leftrightarrow \quad 8\tilde{A}^2\tilde{D} &= \tilde{B} \left( 4\tilde{A}\tilde{C} - \tilde{B}^2 \right) \pm 16\tilde{A}^{5/2}(n+1) \end{aligned} \quad (4.13)$$

Dies ist äquivalent zu der in [Gon 94] angegebenen Bedingung

$$8A^2D + B \left( B^2 - 4AC \right) = \pm 16(n+1)A^{5/2}, \quad A \geq 0, \quad (4.14)$$

da dort mit  $a = 1$  gerechnet wird, sodass die Transformation zu den getildeten Parametern hinfällig ist.

Im physikalischen Kontext stellt sich außerdem die Forderung, dass die Eigenfunktionen normierbar gemäß (2.3) sind. Da der führende Term im Exponenten von (4.16) eine ungerade Potenz besitzt, folgt daraus, dass:

$$\operatorname{Re}(\nu) = 0 \tag{4.15}$$

Andernfalls streben alle Eigenfunktionen entweder für große negative oder große positive  $x$  gegen  $\pm\infty$ . Allerdings steht diese Forderung wegen (4.7) im Widerspruch zu der Annahme  $A > 0$ , kann für ein muldenförmiges quartisches Potenzial also nicht erfüllt sein. Für  $A = 0$  ergibt sich hingegen  $\nu = 0$  und mit (4.8) dann  $B = 0$ , sodass sich der exakt lösbare Fall des harmonischen Oszillators ergibt, der hier nicht behandelt werden soll. Für den Fall  $A < 0$  ergeben sich hingegen rein imaginäre  $\nu$ , sodass die Forderung der Normierbarkeit für  $\operatorname{Re}(\mu) > 0$  erfüllt wird. Gleichung (4.8) führt in diesem Fall allerdings auf ein komplexwertiges  $B$ . Dieser Fall ist z.B. in [Ben 98], [Ere 11], [Gon 93] oder [Zno 00] behandelt, lässt sich allerdings schwierig veranschaulichen und ist physikalisch kaum relevant (siehe Abschnitt 6.2). In der konkreten Rechnung wird daher  $A > 0$  vorausgesetzt und auf Normierbarkeit verzichtet. Die gefundenen Lösungen sind dann nicht mehr als gebundene Ein-Teilchen-Zustände interpretierbar.

## 4.2 Schrödingergleichung und Eigenfunktionen

Die Eigenfunktionen  $\Psi(x)$  werden nun als Superposition der  $n + 1$  Basisfunktionen dargestellt:

$$\Psi(x) = \sum_{k=0}^n c_k \cdot x^k \cdot \exp \left[ -\lambda x - \frac{\mu}{2} x^2 - \frac{\nu}{3} x^3 \right] \tag{4.16}$$

Es bietet sich zur Lösung der Schrödingergleichung an, den zum Potenzial gehörigen Hamiltonoperator erneut als Matrix darzustellen, welche die Koeffizienten der Basisfunktionen  $f_k(x)$  aufeinander abbildet. In der mittleren Spalte von (4.17) sind dabei die Einträge der  $(k - 2)$ -ten,  $(k - 1)$ -ten,  $k$ -ten und  $(k + 1)$ -ten Zeile der  $k$ -ten



$n = 1$

Für  $n = 1$  sollen exakte Eigenfunktionen aus den beiden Basisfunktionen  $f_0(x)$  und  $f_1(x)$  konstruiert werden. Die zugehörige stationäre Schrödingergleichung (4.18) mit (4.17) lautet:

$$\begin{aligned} & -a \begin{pmatrix} \lambda^2 - \mu & -2n\lambda \\ 2\nu n & \lambda^2 - 3\mu \end{pmatrix} \cdot \vec{c} = E \cdot \vec{c} \\ \Leftrightarrow & -a \begin{pmatrix} \lambda^2 - \mu + \tilde{E} & -2\lambda \\ 2\nu & \lambda^2 - 3\mu + \tilde{E} \end{pmatrix} \cdot \vec{c} = 0 \end{aligned} \quad (4.20)$$

Diese Gleichung ist genau dann lösbar, wenn die Determinante der Matrix verschwindet:

$$\begin{aligned} \text{Det}(\mathcal{M}) &= (\lambda^2 - \mu + \tilde{E})(\lambda^2 - 3\mu + \tilde{E}) + 4\lambda\nu = 0 \\ \Leftrightarrow & \tilde{E}^2 + (2\lambda^2 - 4\mu)\tilde{E} + \lambda^4 + 3\mu^2 - 4\lambda^2\mu + 4\lambda\nu = 0 \\ \Rightarrow & \tilde{E}_{\pm} = 2\mu - \lambda^2 \pm \sqrt{(2\mu - \lambda^2)^2 - 4\lambda\nu - \lambda^4 - 3\mu^2 + 4\lambda^2\mu} \\ \Leftrightarrow & \tilde{E}_{\pm} = 2\mu - \lambda^2 \pm \sqrt{\mu^2 - 4\lambda\nu} \end{aligned} \quad (4.21)$$

Da auch komplexwertige Energien  $\tilde{E}$  ausgeschlossen werden, muss außerdem

$$\mu^2 \geq 4\lambda\nu \quad (4.22)$$

gelten. Im Fall der Gleichheit ergibt sich nur ein entarteter Eigenwert  $\tilde{E}$ .

Setzt man diese Eigenwerte in obige Schrödingergleichung ein, so lässt sich das Verhältnis der Koeffizienten  $c_0$  und  $c_1$  bestimmen. Wie zuvor wird  $c_0 = N$  gesetzt und  $N$  später so gewählt, dass die Eigenfunktionen gut mit dem Potenzialverlauf zusammen dargestellt werden können (siehe Abbildung 7). Da die Eigenfunktionen nicht über den ganzen Zahlenraum  $\mathbb{R}$  normierbar sind, werden sie auf geeigneten Teilintervallen normiert. Aus der ersten Zeile obiger Schrödingergleichung folgt dann:

$$\begin{aligned} & (\lambda^2 - \mu + \tilde{E})c_0 - 2\lambda c_1 = 0 \quad c_0 = N \\ \Leftrightarrow & c_1 = N \frac{\mu - \lambda^2 - \tilde{E}}{2\lambda} \\ & = N \frac{\mu \pm \sqrt{\mu^2 - 4\lambda\nu}}{2\lambda} \end{aligned} \quad (4.23)$$

Damit ergeben sich die Wellenfunktionen zu:

$$\Psi_0(x) = N \left( 1 + \frac{\mu - \sqrt{\mu^2 - 4\lambda\nu}}{2\lambda} x \right) \exp \left[ -\lambda x - \frac{\mu}{2} x^2 - \frac{\nu}{3} x^3 \right] \quad (4.24)$$

$$\Psi_1(x) = N' \left( 1 + \frac{\mu + \sqrt{\mu^2 - 4\lambda\nu}}{2\lambda} x \right) \exp \left[ -\lambda x - \frac{\mu}{2} x^2 - \frac{\nu}{3} x^3 \right] \quad (4.25)$$

Die zugehörigen Eigenenergien lauten:

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \tilde{E} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( 2\mu - \lambda^2 - \sqrt{\mu^2 - 4\lambda\nu} \right) \quad (4.26)$$

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \tilde{E} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( 2\mu - \lambda^2 + \sqrt{\mu^2 - 4\lambda\nu} \right) \quad (4.27)$$

In Abbildung 7 sind diese beiden Lösungen für die Parameter  $\nu = 1$ ,  $\mu = 2$  und  $\lambda = -7$  mit dem zugehörigen quartischen Potenzial dargestellt. Nach den zuvor bestimmten Zusammenhängen zwischen den Parametern der Basisfunktion und des Potenzials ergeben sich mit  $a = 1$  die Potenzialparameter zu  $A = 1$ ,  $B = 4$ ,  $C = -10$  und  $D = -32$ . Das Nullniveau der Wellenfunktionen wurde dabei auf ihre Eigenenergien verschoben und die Wellenfunktionen auf die Gesamtaufenthaltswahrscheinlichkeit von 100 für den Bereich  $x = -6$  bis  $x = \infty$  normiert ( $N \approx 4,706 \cdot 10^{-3}$ ,  $N' \approx 4,241 \cdot 10^{-2}$ ). Die Wellenfunktionen streben für  $x \rightarrow -\infty$  gegen  $+\infty$ , was im Bildausschnitt aus Abbildung 7 nicht gezeigt ist.

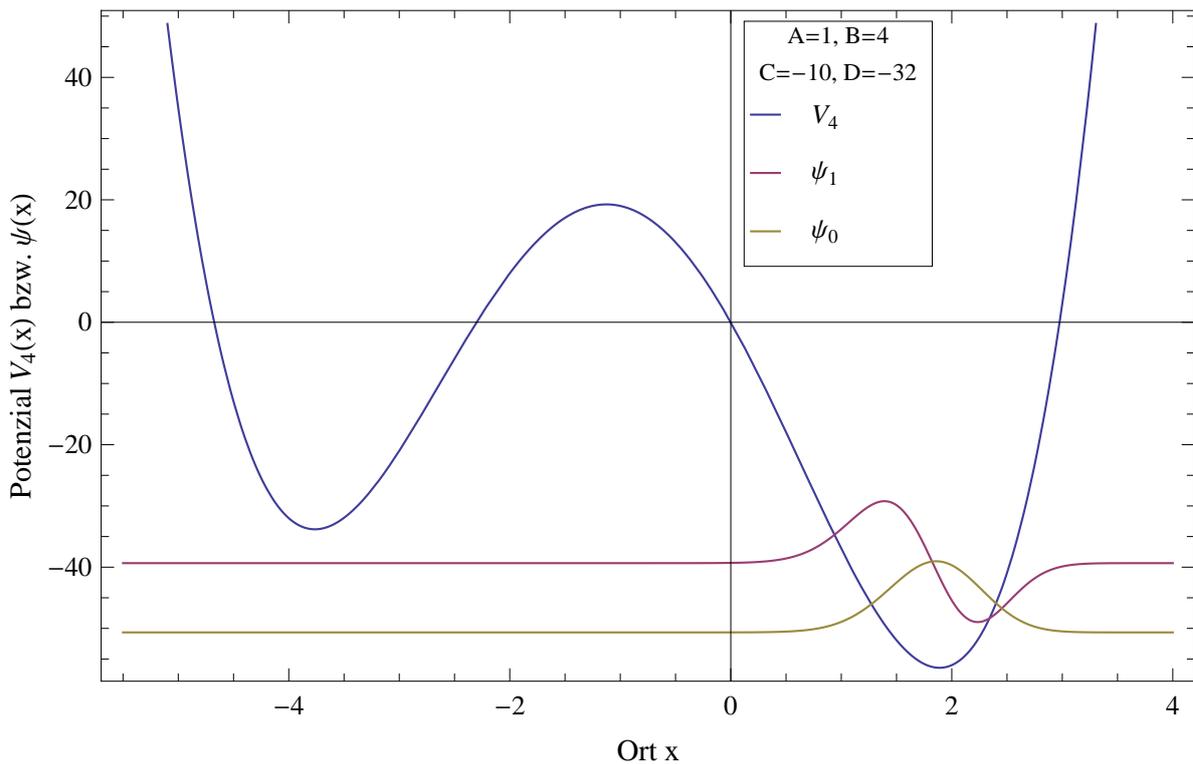


Abbildung 7: Quartisches Potenzial  $V_4(x)$  mit den Parametern  $A = 1$ ,  $B = 4$ ,  $C = -10$  und  $D = -32$  aufgetragen gegen  $x$  (blau). Eingezeichnet sind die beiden mit  $n = 1$  bestimmbaren, exakten Lösungen  $\Psi_0(x)$  und  $\Psi_1(x)$ . Das Nullniveau in  $y$ -Richtung wurde auf die jeweilige Eigenenergie gesetzt.

$n = 2$

Für  $n = 2$  lassen sich maximal drei exakte Eigenfunktionen aus den Basisfunktionen  $f_0(x)$ ,  $f_1(x)$  und  $f_2(x)$  konstruieren. Die zugehörige stationäre Schrödingergleichung (4.18) mit (4.17) lautet:

$$\begin{aligned}
 & -a \begin{pmatrix} \lambda^2 - \mu & -2\lambda & 2 \\ 4\nu & \lambda^2 - 3\mu & -4\lambda \\ 0 & 2\nu & \lambda^2 - 5\mu \end{pmatrix} \cdot \vec{c} = E \cdot \vec{c} \\
 \Leftrightarrow & -a \begin{pmatrix} \lambda^2 - \mu + \tilde{E} & -2\lambda & 2 \\ 4\nu & \lambda^2 - 3\mu + \tilde{E} & -4\lambda \\ 0 & 2\nu & \lambda^2 - 5\mu + \tilde{E} \end{pmatrix} \cdot \vec{c} = 0 \quad (4.28)
 \end{aligned}$$

Dieses Gleichungssystem ist genau dann lösbar, wenn die Determinante der Matrix verschwindet:

$$\begin{aligned}
 \text{Det}(\mathcal{M}) &= (\lambda^2 - \mu + \tilde{E}) (\lambda^2 - 3\mu + \tilde{E}) (\lambda^2 - 5\mu + \tilde{E}) + 16\nu^2 \\
 &+ 8\lambda\nu (\lambda^2 - 5\mu + \tilde{E}) + 8\lambda\nu (\lambda^2 - \mu + \tilde{E}) = 0 \\
 \Leftrightarrow & \tilde{E}^3 + \underbrace{3(\lambda^2 - 3\mu)}_{b_1} \tilde{E}^2 + \underbrace{\left(2(\lambda^2 - 3\mu)^2 + \lambda^4 + 5\mu^2 - 6\lambda^2\mu + 16\lambda\nu\right)}_{b_2} \tilde{E} + \\
 & \underbrace{(\lambda^2 - 3\mu)(\lambda^4 + 5\mu^2 - 6\lambda^2\mu + 16\lambda\nu) + 16\nu^2}_{b_3} = 0
 \end{aligned}$$

Diese Gleichung kann über die Cardanischen Gleichungen gelöst werden. Dazu führt man die Abkürzungen  $p = b_2 - b_1^2/3$  und  $q = 2b_1^3/27 - b_1b_2/3 + b_3$  ein:

$$\begin{aligned}
 p &= 2(\lambda^2 - 3\mu)^2 + \lambda^4 + 5\mu^2 - 6\lambda^2\mu + 16\lambda\nu - 3(\lambda^2 - 3\mu)^2 \\
 &= -\lambda^4 + 6\lambda^2\mu - 9\mu^2 + \lambda^4 - 6\lambda^2\mu + 5\mu^2 + 16\lambda\nu \\
 &= 4(4\lambda - \mu^2) \\
 q &= 2(\lambda^2 - 3\mu)^3 - (\lambda^2 - 3\mu) \left(2(\lambda^2 - 3\mu)^2 + \lambda^4 + 5\mu^2 - 6\lambda^2\mu + 16\lambda\nu\right) \\
 &+ (\lambda^2 - 3\mu)(\lambda^4 + 5\mu^2 - 6\lambda^2\mu + 16\lambda\nu) + 16\nu^2 \\
 &= -(\lambda^2 - 3\mu)(\lambda^4 + 5\mu^2 - 6\lambda^2\mu + 16\lambda\nu - \lambda^4 - 5\mu^2 + 6\lambda^2\mu - 16\lambda\nu) + 16\nu^2 \\
 &= 16\nu^2 = 16\tilde{A} > 0
 \end{aligned}$$

Zur Bestimmung der Anzahl der Lösungen betrachtet man das Vorzeichen der Diskriminante  $D'$ .

$$D' = \left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3 = 2^6\nu^4 + \frac{2^6}{27}(4\lambda - \mu^2)^3 \quad (4.29)$$

$D' > 0$  Es gibt dann genau eine Lösung  $\tilde{E}$  für den Fall  $D' > 0$ , d.h.

$$\nu^4 > \frac{1}{27} (\mu^2 - 4\lambda)^3 . \quad (4.30)$$

Diese Relation ist insbesondere automatisch erfüllt, wenn  $p$  positiv ist, also

$$\mu^2 < 4\lambda .$$

Die zugehörige Eigenenergie für den allgemeineren Fall (4.30) lautet:

$$\tilde{E} = -\frac{b_1}{3} + \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{D'}} + \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{D'}} \quad (4.31)$$

Allerdings ist es dabei recht aufwändig die dritten Wurzeln zu bestimmen. Diese Rechnung sei hier nicht durchgeführt.

$D' = 0$  Der Fall  $D' = 0$  liegt vor für

$$\nu^4 = \frac{1}{27} (\mu^2 - 4\lambda)^3 \quad (4.32)$$

und es resultieren zwei Lösungen  $z_e$ , da  $q \neq 0$  ist:

$$z_0 = \frac{3q}{p} = \frac{12\nu^2}{4\lambda - \mu^2}$$

$$z_1 = -\frac{3q}{2p} = -\frac{6\nu^2}{4\lambda - \mu^2}$$

Insbesondere ist auch der Nenner unkritisch, da für  $D' = 0$  wegen  $q > 0$  direkt  $p \neq 0$  folgt. Die zugehörigen Eigenenergien lauten:

$$\tilde{E}_0 = \frac{12\nu^2}{4\lambda - \mu^2} - \lambda^2 + 3\mu \quad (4.33)$$

$$\tilde{E}_1 = -\frac{6\nu^2}{4\lambda - \mu^2} - \lambda^2 + 3\mu \quad (4.34)$$

$D' < 0$  Es existieren hingegen drei reelle Lösungen  $z_e$ , wenn  $D' < 0$  ist, d.h.

$$\nu^4 < -\frac{1}{27} (\mu^2 - 4\lambda)^3 . \quad (4.35)$$

Dieser Fall soll im Folgenden konkret betrachtet werden. Die zugehörigen Eigenenergien lauten dann:

$$\begin{aligned}
 E_0 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left( z_3 - \frac{b_1}{3} \right) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ -\lambda^2 + 3\mu - \sqrt{\frac{-4}{3}} p \cdot \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \frac{-q}{2} \cdot \sqrt{\frac{-27}{p^3}} \right) - \frac{\pi}{3} \right) \right] \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[ -\lambda^2 + 3\mu - 4 \left( \frac{\mu^2 - 4\lambda}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( -\nu^2 \sqrt{27} (\mu^2 - 4\lambda)^{-3/2} \right) - \frac{\pi}{3} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{4.36}$$

$$\begin{aligned}
 E_1 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left( z_1 - \frac{b_1}{3} \right) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ -\lambda^2 + 3\mu - \sqrt{\frac{-4}{3}} p \cdot \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \frac{-q}{2} \cdot \sqrt{\frac{-27}{p^3}} \right) + \frac{\pi}{3} \right) \right] \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[ -\lambda^2 + 3\mu - 4 \left( \frac{\mu^2 - 4\lambda}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( -\nu^2 \sqrt{27} (\mu^2 - 4\lambda)^{-3/2} \right) + \frac{\pi}{3} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{4.37}$$

$$\begin{aligned}
 E_2 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left( z_2 - \frac{b_1}{3} \right) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ -\lambda^2 + 3\mu + \sqrt{\frac{-4}{3}} p \cdot \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \frac{-q}{2} \cdot \sqrt{\frac{-27}{p^3}} \right) \right) \right] \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[ -\lambda^2 + 3\mu + 4 \left( \frac{\mu^2 - 4\lambda}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( -\nu^2 \sqrt{27} (\mu^2 - 4\lambda)^{-3/2} \right) \right) \right]
 \end{aligned} \tag{4.38}$$

Die Koeffizienten der Basisfunktionen  $c_0$ ,  $c_1$  und  $c_2$  lassen sich über die erste und dritte Zeile der Schrödingergleichung (4.28) bestimmen. Dies wird nun für die drei Lösungen durchgeführt. Dazu wird ähnlich wie zuvor  $c_2 = N$  gewählt und die resultierenden Eigenfunktionen nachträglich auf Teilintervallen normiert.

$$\begin{aligned}
 2\nu c_1 + (\lambda^2 - 5\mu + \tilde{E}) c_2 &= 0 & c_2 &= N \\
 \Leftrightarrow c_1 &= -N \frac{\lambda^2 - 5\mu + \tilde{E}}{2\nu}, & & \tag{4.39}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\lambda^2 - \mu + \tilde{E}) c_0 - 2\lambda c_1 + 2c_2 &= 0 \\
 \Leftrightarrow c_0 &= \frac{1}{\lambda^2 - \mu + \tilde{E}} \cdot (2\lambda \cdot c_1 - 2N) \\
 &= -\frac{N}{\lambda^2 - \mu + \tilde{E}} \cdot \left( 2 + \frac{\lambda}{\nu} \cdot (\lambda^2 - 5\mu + \tilde{E}) \right)
 \end{aligned} \tag{4.40}$$

Damit ergeben sich die Wellenfunktionen zu:

$$\Psi_0(x) = N \left\{ \left( 2 + \frac{\lambda}{\nu} \right) \frac{-\mu - 2 \left( \frac{\mu^2 - 4\lambda}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( -\nu^2 \sqrt{27} (\mu^2 - 4\lambda)^{-3/2} \right) - \frac{\pi}{3} \right)}{\mu - 2 \left( \frac{\mu^2 - 4\lambda}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( -\nu^2 \sqrt{27} (\mu^2 - 4\lambda)^{-3/2} \right) - \frac{\pi}{3} \right)} - \frac{1}{\nu} \left( \mu + 2 \left( \frac{\mu^2 - 4\lambda}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( -\nu^2 \sqrt{27} (\mu^2 - 4\lambda)^{-3/2} \right) - \frac{\pi}{3} \right) \right) x + x^2 \right\} \cdot e^{-\lambda x - \frac{\mu}{2} x^2 - \frac{\nu}{3} x^3} \quad (4.41)$$

$$\Psi_1(x) = N' \left\{ \left( 2 + \frac{\lambda}{\nu} \right) \frac{-\mu - 2 \left( \frac{\mu^2 - 4\lambda}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( -\nu^2 \sqrt{27} (\mu^2 - 4\lambda)^{-3/2} \right) + \frac{\pi}{3} \right)}{\mu - 2 \left( \frac{\mu^2 - 4\lambda}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( -\nu^2 \sqrt{27} (\mu^2 - 4\lambda)^{-3/2} \right) + \frac{\pi}{3} \right)} - \frac{1}{\nu} \left( \mu + 2 \left( \frac{\mu^2 - 4\lambda}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( -\nu^2 \sqrt{27} (\mu^2 - 4\lambda)^{-3/2} \right) + \frac{\pi}{3} \right) \right) x + x^2 \right\} \cdot e^{-\lambda x - \frac{\mu}{2} x^2 - \frac{\nu}{3} x^3} \quad (4.42)$$

$$\Psi_2(x) = N'' \left\{ \left( 2 + \frac{\lambda}{\nu} \right) \frac{-\mu + 2 \left( \frac{\mu^2 - 4\lambda}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( -\nu^2 \sqrt{27} (\mu^2 - 4\lambda)^{-3/2} \right) \right)}{\mu + 2 \left( \frac{\mu^2 - 4\lambda}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( -\nu^2 \sqrt{27} (\mu^2 - 4\lambda)^{-3/2} \right) \right)} - \frac{1}{\nu} \left( \mu - 2 \left( \frac{\mu^2 - 4\lambda}{3} \right)^{1/2} \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( -\nu^2 \sqrt{27} (\mu^2 - 4\lambda)^{-3/2} \right) \right) \right) x + x^2 \right\} \cdot e^{-\lambda x - \frac{\mu}{2} x^2 - \frac{\nu}{3} x^3} \quad (4.43)$$

In Abbildung 8 sind diese drei Lösungen für die Parameter  $\nu = 1$ ,  $\mu = 2$  und  $\lambda = -7$  mit dem zugehörigen quartischen Potenzial dargestellt. Nach den zuvor bestimmten Zusammenhängen zwischen den Parametern der Basisfunktionen und des Potenzials ergeben sich mit  $a = 1$  die Potenzialparameter zu  $A = 1$ ,  $B = 4$ ,  $C = -10$  und  $D = -34$ . Das Nullniveau der Wellenfunktionen wurde dabei auf ihre Eigenenergie verschoben und die Wellenfunktionen auf die Gesamtaufenthaltswahrscheinlichkeit von  $100/3$  für den Bereich  $x = -6$  bis  $x = \infty$  normiert ( $N \approx 1,518 \cdot 10^{-4}$ ,  $N' \approx 2,945 \cdot 10^{-3}$ ,  $N'' \approx 3,850 \cdot 10^{-2}$ ). Der Faktor  $1/3$  wurde dabei eingefügt, um Überschneidungen der Funktionsgraphen zu vermeiden. Die Wellenfunktionen streben für  $x \rightarrow -\infty$  gegen  $+\infty$ , was im Bildausschnitt aus Abbildung 8 nicht gezeigt ist.

#### 4.4 Gestalt des Potenzials

Zur Gestaltuntersuchung des Potenzials  $V_4(x)$  gilt es, die Anzahl der auftretenden Mulden (d.h. lokaler Minima) in Abhängigkeit der Koeffizienten  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$  zu bestimmen. Dies kann wie zuvor über das notwendige Kriterium für ein Extremum

#### 4. QUARTISCHES POTENZIAL $V_4$

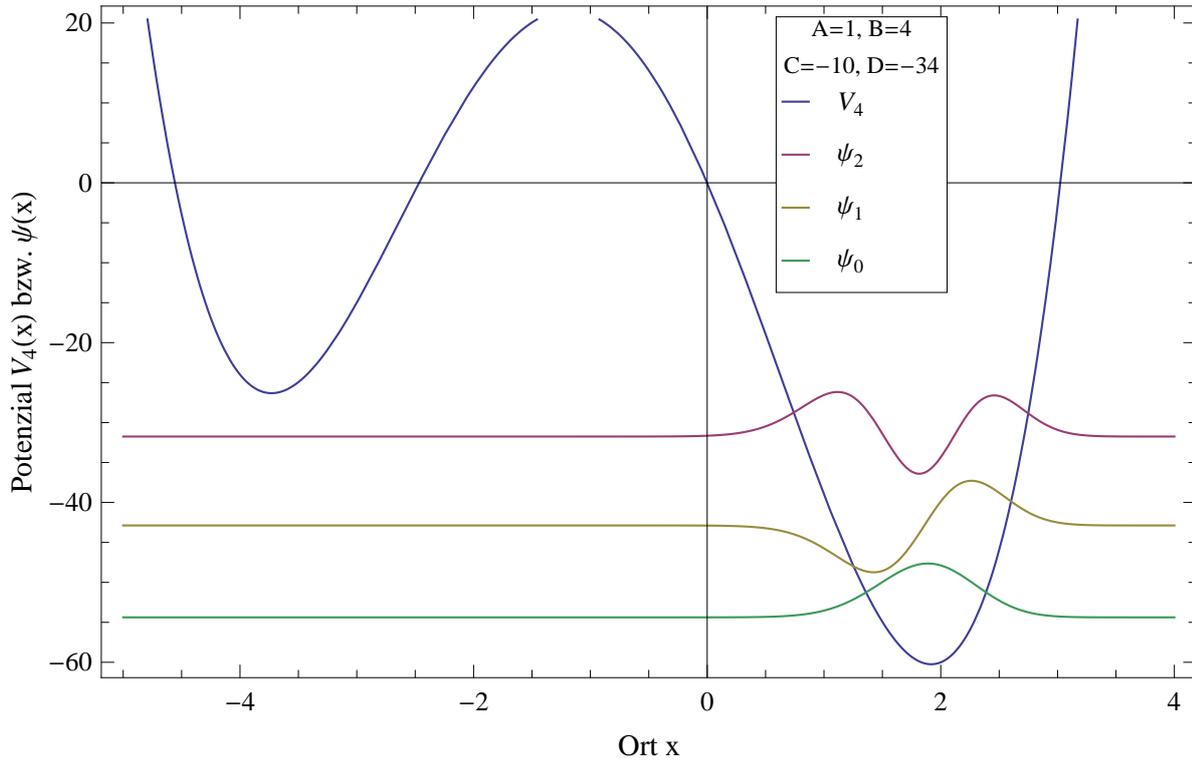


Abbildung 8: Quartisches Potenzial  $V_4(x)$  mit den Parametern  $A = 1$ ,  $B = 4$ ,  $C = -10$  und  $D = -34$  aufgetragen gegen  $x$  (blau). Eingezeichnet sind die drei für  $n = 2$  bestimmbaren, exakten Lösungen  $\Psi_0(x)$ ,  $\Psi_1(x)$  und  $\Psi_2(x)$ . Das Nullniveau in  $y$ -Richtung wurde auf die jeweilige Eigenenergie gesetzt.

im Punkt  $x_e$  versucht werden, was für dieses Potenzial aber keine vollständig allgemeine Bestimmungsgleichung liefern wird. Stattdessen soll zumindest eine erste Abschätzung der Potenzialform hergeleitet werden. Im Folgenden soll das Potenzial die Lösbarkeitsbedingung (4.13) erfüllen, d.h. die Form (4.12) haben.

Zunächst bestimmt der Koeffizient des Terms  $Ax^4$  das Verhalten des Potenzials für große  $x$ . Durch die Forderung  $A > 0$  wird dabei die Form einer Mulde vorgegeben. Das notwendige Kriterium für ein Extremum

$$V_4'(x_e) = 0$$

liefert dann die Bedingung:

$$4\nu^2 x_e^3 + 6\mu\nu x_e^2 + 2(\mu^2 + 2\lambda\nu)x_e + 2\lambda\nu - \nu(n+1) = 0 \quad (4.44)$$

Diese Gleichung dritten Grades hat nach den Cardanischen Formeln maximal drei reelle Lösungen  $x_e$ . Da Minima und Maxima stets abwechselnd auftreten, hat das

Potenzial also entweder eine oder zwei Mulden. Insbesondere ist der Fall zweier Extrema  $x_e$  ausgeschlossen, da dies im Widerspruch zum geforderten Verhalten für große  $x$  steht. Die Anzahl der reellen Lösungen zu (4.44) lässt sich prinzipiell über das Vorzeichen der Diskriminante  $D'$  bestimmen, wie für das sextische Potenzial durchgeführt wurde. Dazu wird (4.44) zunächst durch  $4\nu^2$  geteilt:

$$x_e^3 + \underbrace{\frac{3\mu}{2\nu}}_{b_1} x_e^2 + \underbrace{\left(\frac{\mu^2}{2\nu^2} + \frac{\lambda}{\nu}\right)}_{b_2} x_e + \underbrace{\frac{\lambda}{2\nu} - \frac{n+1}{4\nu}}_{b_3} = 0 \quad (4.45)$$

$$\Leftrightarrow z_e^3 + pz_e + q = 0$$

Dabei wurden die durch geschweifte Klammern angedeuteten Abkürzungen  $b_1, b_2, b_3$  sowie  $z = x + \frac{b_1}{3}$ ,  $p = b_2 - \frac{b_1^2}{3}$  und  $q = \frac{2b_1^3}{27} - \frac{b_1b_2}{3} + b_3$  verwendet.

$$p = \frac{\mu^2}{2\nu^2} + \frac{\lambda}{\nu} - \frac{3\mu^2}{4\nu^2} = -\frac{\mu^2}{2\nu^2} + \frac{\lambda}{\nu} \quad (4.46)$$

$$\begin{aligned} q &= \frac{\mu^3}{4\nu^3} - \frac{\mu}{2\nu} \left(\frac{\mu^2}{2\nu^2} + \frac{\lambda}{\nu}\right) + \frac{\lambda}{2\nu} - \frac{n+1}{4\nu} \\ &= -\frac{\lambda\mu}{2\nu^2} + \frac{\lambda}{2\nu} - \frac{n+1}{4\nu} \end{aligned} \quad (4.47)$$

Hieraus ergibt sich die Diskriminante

$$D' = \left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3, \quad (4.48)$$

über deren Vorzeichen im Rahmen dieser Arbeit keine vereinfachten Bedingungen bestimmt werden konnten. Es kann lediglich direkt abgelesen werden, dass die Diskriminante negativ ist, wenn  $p < 0$  und

$$\left(\frac{q}{2}\right)^2 < -\left(\frac{p}{3}\right)^3. \quad (4.49)$$

Im Falle der Gleichheit ist die Diskriminante gleich Null und für den umgekehrten Fall („größer“) sowie allgemein für  $p > 0$  positiv. Dies entspricht einer Mulde im Potenzialverlauf, da genau zwei Extrema (wie für  $D' = 0$  zunächst möglich) nicht mit der Muldenform des Potenzials vereinbar sind. Der Fall  $p > 0$  ist gleichbedeutend mit:

$$\mu^2 < 2\lambda\nu \quad (4.50)$$

Für  $D' < 0$  existieren hingegen drei reelle Lösungen  $x_e$  der Gleichung (4.45). Aus diesen resultieren zwei Mulden mit einem dazwischenliegenden Maximum, wenn

#### 4. QUARTISCHES POTENZIAL $V_4$

---

auch eine hinreichende Bedingung für ein Extremum an diesen Stellen  $x_e$  erfüllt ist. Es kann sich also für

$$\mu^2 < 2\lambda\nu$$

lediglich eine Mulde im Potenzialverlauf ergeben. Das Vorhandensein zweier Mulden ist an weitere Bedingungen gebunden, welche hier nicht näher ausgewertet werden konnten.

An dieser Stelle wird auf umfassende Betrachtungen von Spezialfällen verzichtet und auch die konkrete Berechnung der Diskriminante ausgespart. Ein Spezialfall wurde jedoch bereits bei der Betrachtung des sextischen Potenzials behandelt, nämlich für  $B = D = 0$ . Die Ergebnisse sind dabei in Tabelle 1 zusammengefasst. Die dabei verwendeten Bezeichnungen beziehen sich auf das sextische Potenzial, d.h.  $A$  entspricht dort  $B$ .

In Abbildung 9 ist  $V_4(x)$  für  $A = 1$ ,  $B = 4$ ,  $D = C - 5 - n$  mit  $n = 5$  und verschiedene Werte von  $C$  gezeigt, welche die vorausgesetzte Lösbarkeitsbedingung erfüllen. Abbildung 10 zeigt das Potenzial für  $A = 1$ ,  $C = -2$ ,  $D = -3 - n - B^2$  mit  $n = 2$  und verschiedene Werte von  $B$ .

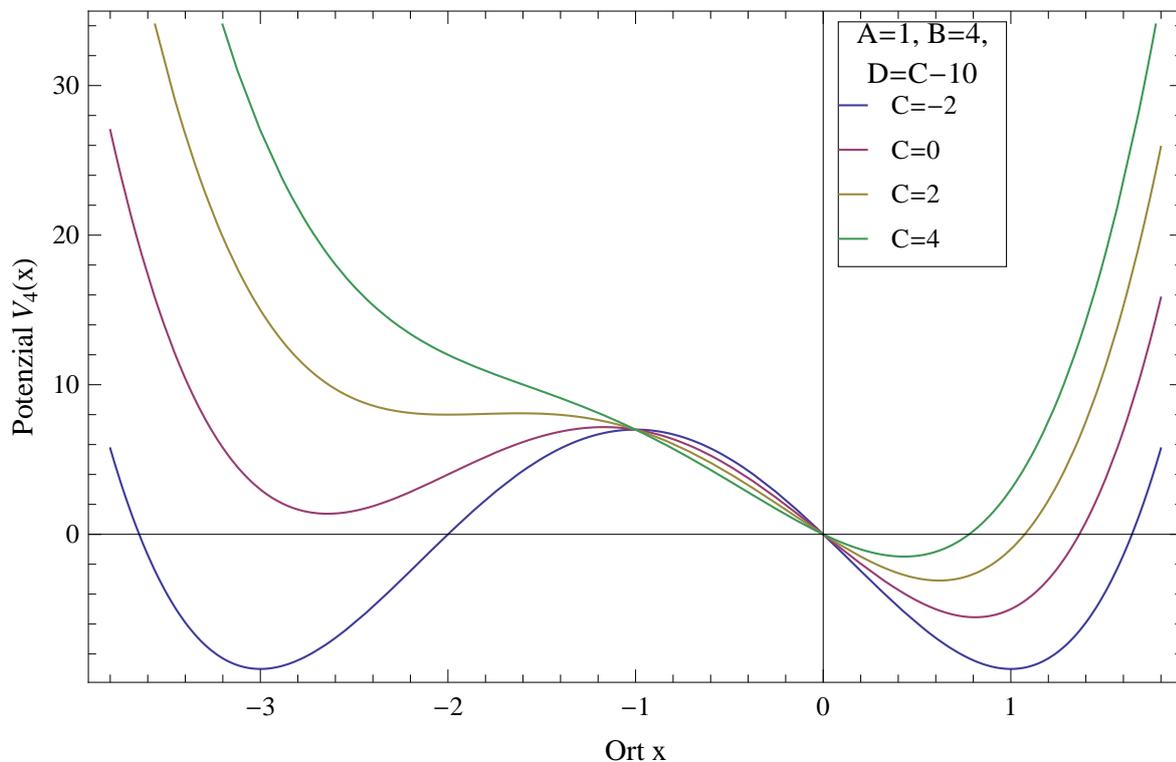


Abbildung 9: Quartisches Potenzial  $V_4(x)$  aufgetragen gegen  $x$  für verschiedene Parameter  $C$  mit  $A = 1$ ,  $B = 4$  und  $D = C - 5 - n$  für  $n = 5$

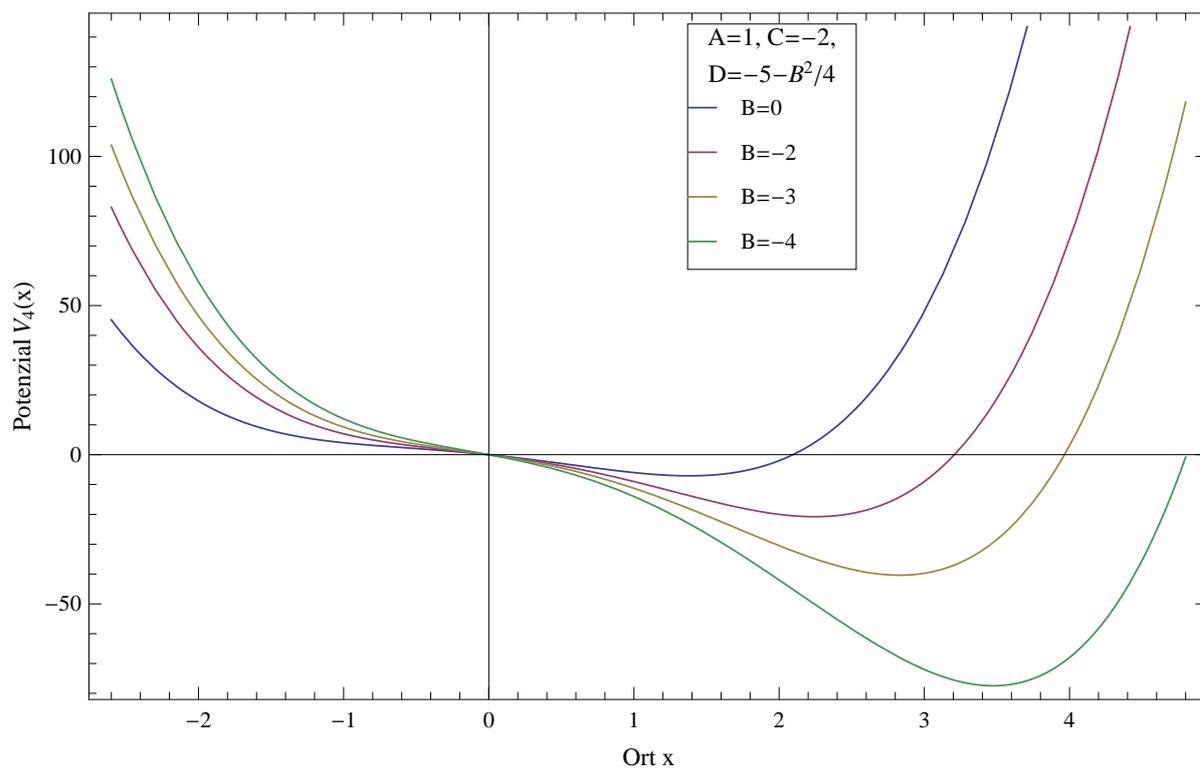


Abbildung 10: Quartisches Potenzial  $V_4(x)$  aufgetragen gegen Ort  $x$  für verschiedene Parameter  $B$  mit  $A = 1$ ,  $C = -2$  und  $D = -3 - n - B^2$  für  $n = 2$

## 5 Potenziale höherer Potenzen

Die beiden zuvor behandelten Potenziale führen zu der Überlegung, ob über eine analoge Konstruktion auch z.B. für ein oktives Potenzial  $V_8(x)$  exakte, normierbare Eigenfunktionen bestimmt werden können. Dieses Potenzial hat die Form

$$V_8(x) = A \cdot x^8 + B \cdot x^6 + C \cdot x^4 + D \cdot x^2 \quad (5.1)$$

$$=: \frac{1}{a} \left( \tilde{A}x^8 + \tilde{B}x^6 + \tilde{C}x^4 + \tilde{D}x^2 \right), \quad (5.2)$$

wobei  $A, B, C, D$  reellwertige Koeffizienten bezeichnen und  $a = \frac{\hbar^2}{2m}$  ist. Dazu betrachte man die Eigen- und Basisfunktionen des sextischen Potenzials. Wie in Abschnitt 2 erläutert, ist es für die Anwendung auf das oktische Potenzial notwendig, einen Term höherer Ordnung in das Polynom  $p_2(x)$  aus dem Exponenten der Basisfunktion hinzuzufügen (vgl. Gleichung (2.5), bzw. (2.4)). Andernfalls kann der Term  $A \cdot x^8$  des Potenzials nicht über den Term  $p_2'(x)$  aus der zweifachen Ableitung der Basisfunktion in der Schrödingergleichung ausgeglichen werden (siehe Abschnitt 2.2). Wie im Fall des quartischen Potenzials gesehen, muss es sich dabei um einen Term mit geradem Exponenten handeln, um die Forderung der Normierbarkeit erfüllen zu können (was für das quartische Potenzial nicht möglich war). Die Basisfunktionen  $f_k(x)$  werden daher mit folgender Form angesetzt:

$$f_k(x) = x^k \cdot \exp \left[ -\frac{\lambda}{2}x^2 - \frac{\mu}{4}x^4 - \frac{\nu}{6}x^6 \right] \quad (5.3)$$

Wie zuvor läuft  $k \in \mathbb{N}_0$  dabei bis zu einem bestimmten  $n$ . Die entsprechenden Eigenfunktionen lauten dann

$$\Psi(x) = p_1(x) \cdot \exp \left[ -\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4 - \frac{\lambda}{6}x^6 \right], \quad (5.4)$$

mit  $p_1(x)$  einem Polynom des Grades  $n$  in  $x$ . Betrachtet man dann die Wirkung des zugehörigen Hamiltonoperators

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_8(x) \quad (5.5)$$

auf die Basisfunktionen  $f_k(x)$ , so zeigt sich, dass dieser Ansatz keine Eigenlösungen der Schrödingergleichung liefern kann:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}f_k(x) &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_8(x) \right) x^k \cdot e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4 - \frac{\lambda}{6}x^6} & a &:= \frac{\hbar^2}{2m} \\
 &= -a \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left[ k \cdot x^{k-1} - x^k (\mu x + \nu x^3 + \lambda x^5) \right] e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4 - \frac{\lambda}{6}x^6} \right] + V_8(x) f_k(x) \\
 &= -a \left[ k(k-1)x^{k-2} - 2kx^{k-1} (\mu x + \nu x^3 + \lambda x^5) - x^k (\mu + 3\nu x^2 + 5\lambda x^4) \right. \\
 &\quad \left. + x^k (\mu x + \nu x^3 + \lambda x^5)^2 \right] e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4 - \frac{\lambda}{6}x^6} + V_8(x) f_k(x) \\
 &= -a \left[ k(k-1)x^{k-2} - 2k (\mu x^k + \nu x^{k+2} + \lambda x^{k+4}) - \mu x^k - 3\nu x^{k+2} \right. \\
 &\quad \left. - 5\lambda x^{k+4} + x^k (\mu^2 x^2 + 2\mu\nu x^4 + 2\lambda\mu x^6 + \nu^2 x^6 + 2\lambda\nu x^8 + \lambda^2 x^{10}) \right] \\
 &\quad \cdot e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4 - \frac{\lambda}{6}x^6} + V_8(x) f_k(x) \\
 &= -a \left[ k(k-1)x^{k-2} - (2k+1)\mu x^k + (\mu^2 - (3+2k)\nu - \tilde{D}) x^{k+2} \right. \\
 &\quad \left. + (2\mu\nu - 2k\lambda - 5\lambda - \tilde{C}) x^{k+4} + (\nu^2 + 2\lambda\mu - \tilde{B}) x^{k+6} \right. \\
 &\quad \left. + (2\lambda\nu - \tilde{A}) x^{k+8} + \lambda^2 x^{k+10} \right] e^{-\frac{\mu}{2}x^2 - \frac{\nu}{4}x^4 - \frac{\lambda}{6}x^6} \tag{5.6}
 \end{aligned}$$

Da der im Vergleich zum sextischen Potenzial hinzugekommene Term in der Exponentialfunktion eine gerade Potenz aufweist, treten im polynomialen Vorfaktor der Exponentialfunktion wiederum nur Terme auf, deren Potenz in  $x$  die selbe Parität aufweist. Es ist direkt erkennbar, dass der letzte auftretende Term  $\propto x^{k+10}$  für  $k = n$  weder durch einen Potenzialterm, noch durch eine andere Basisfunktion mit  $k < n$  ausgeglichen werden kann. Daraus folgt die Bedingung

$$\lambda = 0. \tag{5.7}$$

Für  $k = n$  muss dann auch der Vorfaktor des Terms  $\propto x^{k+8}$  Null ergeben. Hieraus folgt mit (5.7), dass

$$\tilde{A} = 2\lambda\nu = 0. \tag{5.8}$$

Diese Bedingung bedeutet nichts anderes, als dass sich das bereits behandelte, sextische Potenzial ergibt, sprich das oktische Potenzial mit diesem Ansatz nicht lösbar ist.

Allgemeiner liegt dies daran, dass die Forderung der Normierbarkeit der Eigenfunktion einen geraden Exponenten des führenden Terms in der Exponentialfunktion der Basisfunktionen impliziert. Der führende Term in dem Polynom  $p_2^2(x)$  kann dann nur in Schritten von  $2^2 = 4$  Potenzen geändert werden. Entsprechend können über die hier benutzte Konstruktionsweise nur dann exakte, normierbare Eigenfunktionen

gefunden werden, wenn auch der führende Term des Potentials in Schritten von vier Potenzen geändert wird (also für ein quadratisch, sextisches, dekadische, usw.).

Konkret bedeutet dies hier, dass möglicher Weise wieder exakte Lösungen konstruiert werden können, wenn der letzte Term aus (5.6) durch einen Potenzialterm  $\propto x^{10}$  ausgeglichen wird, d.h. für ein dekadisches Potenzial

$$V_{10}(x) = F \cdot x^{10} + A \cdot x^8 + B \cdot x^6 + C \cdot x^4 + D \cdot x^2. \quad (5.9)$$

Betrachtet man nun die entsprechend abgewandelte Gleichung (5.6), so stellt man fest, dass der Parameter  $k$  bereits im Vorfaktor des Terms  $\propto x^{k+4}$  auftritt. Dies verhindert die quasi-exakte Lösbarkeit des dekadischen Potentials. Wie zuvor gezeigt, müssen die Vorfaktoren aller Terme, deren Potenz  $k$  überschreitet, für  $k = n$  Null ergeben, da diese über keine anderen Basisfunktionen dargestellt werden können. Die Terme der Potenzen  $\propto x^{k+6}$ ,  $\propto x^{k+8}$  und  $\propto x^{k+10}$  ergeben dann unabhängig von  $k$  Null. Der Term  $\propto x^{k+4}$  ergibt für  $k < n$  jedoch Beiträge ungleich Null. Für  $k = n - 2$  übersteigt die resultierende Potenz allerdings noch die maximal darstellbare Potenz  $n$ , sodass keine quasi-exakten Lösungen konstruiert werden können. Allgemein wird die  $k$ -Abhängigkeit für Potentiale höherer Potenzen in den Vorfaktoren mehrerer kritischer Terme auftreten, sodass für diese keine quasi-exakten Lösungen konstruiert werden können.

Andererseits kann ein Term  $-\frac{\kappa}{5}x^5$  in die Exponentialfunktion eingeführt werden. In diesem Fall hat der führende Term aus  $p_2^2(x)$  wiederum die selbe Potenz wie der führende Term aus  $V_8(x)$  und die Konstruktion einer exakten Eigenfunktion ist prinzipiell wieder möglich. Für ein muldenförmiges Potenzial, d.h. einen führenden Potenzialterm mit positivem Vorzeichen, muss  $\kappa$  dann reell gewählt werden. Dadurch sind die entsprechenden Basis- und Eigenfunktionen (unter entsprechenden Lösbarkeitsbedingungen) nicht mehr normierbar, da sie für  $\kappa > 0$  für  $x \rightarrow -\infty$  bzw. für  $\kappa < 0$  für  $x \rightarrow \infty$  gegen Unendlich gehen. Es ist außerdem möglich, den Koeffizienten des führenden Terms der Exponentialfunktion  $\kappa$  imaginär zu wählen. Die Normierung kann dann über den nachfolgenden Term gerader Potenz gelingen. Es resultiert allerdings ein negativer Koeffizient des führenden Terms des Potentials als Lösbarkeitsbedingung, also ein Potenzialwall. Dies liegt darin begründet, dass der führende Potenzialterm sich mit dem Quadrat der Ableitung des führenden Terms der Exponentialfunktion aufheben muss. Da der Koeffizient dieses Terms aus der Exponentialfunktion imaginär ist, ergibt sich eine Gleichung der Art:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m}\kappa^2 x^n + A \cdot x^n = 0 \\ \Leftrightarrow & \quad A = \frac{\hbar^2}{2m}\kappa^2 < 0 \end{aligned}$$

$\kappa$  ist dabei besagter Koeffizient des führenden Terms der Exponentialfunktion und  $A \cdot x^n$  der führende Term des Potentials. Ähnlich wie im zuvor behandelten Fall (also das sextische Potential, das dekadische, usw.) beobachtet, nimmt die Anzahl der  $k$ -abhängigen Terme, die als Lösbarkeitsbedingung zu Null gewählt werden müssen, für Potentiale steigender Potenz jedoch zu. Dadurch treten wie zuvor am Beispiel des dekadischen Potentials gesehen Widersprüche in den Lösbarkeitsbedingungen auf und es können keine quasi-exakten Lösungen konstruiert werden.

Es lässt sich außerdem anmerken, dass das oktische Potential  $V_8(x)$  über die Transformation  $z := x^2$  mit  $z \geq 0$  in ein quartisches Potential

$$V_8(z) = Az^4 + Bz^3 + Cz^2 + Dz$$

überführt werden kann. In der Schrödingergleichung muss dann auch die zweifache Ableitung entsprechend transformiert werden:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = 4z \frac{\partial}{\partial z} \left( z \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

Das oktische Potentialproblem entspricht also dem Quartischen für positive  $z$  und einen geänderten Differentialoperator.

Dies ist insbesondere interessant, wenn quasi-exakte Lösbarkeit in einem rein mathematischen Zusammenhang für allgemeinere Differentialoperatoren betrachtet wird.

## 6 Zusammenfassung und Diskussion

Im Rahmen dieser Arbeit konnten die allgemeinen algebraischen Lösbarkeitsbedingungen der stationären Schrödingergleichung für das quartische und das sextische Muldenpotenzial in Übereinstimmung mit [Gon 94] hergeleitet werden. Darüber hinaus wurde die Forderung der Normierbarkeit der unter diesen Bedingungen bestimmbaren Lösungen ausgewertet (siehe dazu auch [Gon 93]).

### 6.1 Sextisches Potenzial

Es zeigte sich, dass die Normierbarkeit im Fall des sextischen Potenzials problemlos gefordert werden kann. Die unter diesen Bedingungen bestimmbaren Lösungen zerfallen dann in gerade und ungerade Funktionen. Für Fälle niedriger Dimensionen (also von zwei, bzw. drei Basisfunktionen ausgehend, jeweils für gerade und ungerade Funktionen) konnten dann allgemein Lösungen der stationären Schrödingergleichung in Abhängigkeit der Potenzialparameter sowie die zugehörigen Eigenenergien bestimmt werden. Dabei konnten jeweils genauso viele Lösungen bestimmt werden, wie Basisfunktionen verwendet wurden. Diese wurden für bestimmte Potenzialparameter dargestellt, wobei die Potenzialparameter für die verschiedenen Dimensionen möglichst vergleichbar gehalten wurden. Die Lösungen zeigten das erwartete Verhalten mit großen Funktionswerten innerhalb der jeweils tiefsten Mulden und verschwindenden Funktionswerten außerhalb.

Anschließend wurde die Gestalt des Potenzials untersucht. In Abhängigkeit der Potenzialparameter konnte dieses als einfach-, zweifach- oder dreifach-Muldenpotenzial klassifiziert werden.

### 6.2 Quartisches Potenzial

Für das quartische Muldenpotenzial war die Forderung der Normierbarkeit der Lösungen nicht mit den übrigen Forderungen vereinbar. Konkret steht die Normierbarkeit in diesem Fall im Widerspruch zu dem geforderten muldenförmigen Potenzialverlauf und führt außerdem auf komplexwertige Potenzialparameter und Lösungen. Dieser Fall komplexwertiger Potenzialparameter wurde für das quartische Potenzial in der Literatur bereits detailliert behandelt (siehe z.B. [Ben 98], [Ere 11] oder [Zno 00]). Physikalisch sind komplexwertige Potenzialparameter jedoch wenig relevant und kommen z.B. in der Streutheorie zur Beschreibung von nicht-elastischen Stößen bei Kernreaktionen vor (siehe [Gra 72], Kapitel 9. Optisches Potenzial). Da-

her wurde die Forderung der Normierbarkeit der Lösungsfunktionen hier verworfen. Unter den zuvor formulierten Bedingungen wurden dann die bestimmbareren Lösungen der stationären Schrödingergleichung sowie die zugehörigen Eigenenergien für die Fälle niedriger Dimensionen berechnet. Da die Lösungen hier nicht in gerade und ungerade Funktionen aufspalten, waren dies hier zwei Fälle, nämlich ausgehend von zwei, bzw. drei Basisfunktionen. In Abhängigkeit der Potenzialparameter traten dabei auch entartete Eigenenergien auf sowie der Fall, dass weniger Eigenfunktionen bestimmt werden können, als Basisfunktionen verwendet werden. Für den Fall gleichvieler bestimmbarer Eigenfunktionen wie verwendeter Basisfunktionen wurden erstere für bestimmte Potenzialparameter dargestellt. Diese wiesen erneut das erwartete Verhalten auf.

Auch hier wurde die Gestalt des Potentials untersucht, welche eine bzw. zwei Mulden aufweisen kann. Es war im Rahmen dieser Bachelorarbeit nicht möglich, die Gestalt allgemein zu klassifizieren. Stattdessen wurde eine Abschätzung der Anzahl der Mulden in Abhängigkeit der Potenzialparameter angestellt.

### **6.3 Lösbarkeit und Normierbarkeit für Potenziale höherer Potenzen**

Die zuvor angestellten Betrachtungen konnten abschließend verallgemeinert werden. Es zeigte sich ein Zusammenhang zwischen der Potenz des führenden Potenzialterms und der Vereinbarkeit der algebraischen Lösbarkeitsbedingungen mit den physikalischen Forderungen (Normierbarkeit der Lösungen und reelle Potenzialparameter). Es wurde weiterhin nachvollziehbar, dass die Lösbarkeitsbedingungen für Potenziale höherer Potenzen schnell auf Widersprüche führen, sodass keine quasi-exakten Lösungen konstruiert werden können. Außerdem zeigte sich ein Zusammenhang verschiedener Potenziale unter Transformation des Differentialoperators aus dem Hamiltonoperator.

# Literaturverzeichnis

- [Bag 03] Bagchi, B.; Ganguly, A. (2003): A unified treatment of exactly solvable and quasi-exactly solvable quantum potentials, *J. Phys. A: Math. Gen.* **36** (2003) L161-L167
- [Ben 98] Bender, C.M.; Boettcher, S. (1998): Quasi-exactly solvable quartic potential, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31** (1998) L273-L277
- [Cha 84] Chaudhuri, R. N.; Mukherjee, B. (1984): On the  $\mu x^2 + \lambda x^4 + \eta x^6$  interaction, *J. Phys. A: Math. Gen.* **17** (1984) 3327-3334
- [Ere 11] Eremenko, A.; Gabrielov, A. (2011): Quasi-exactly solvable quartic: elementary integrals and asymptotics, *J. Phys. A: Math. Theor.* **44** (2011) 312001
- [Gon 93] González-López, A.; Kamran, N.; Olver, P.J. (1992): Normalizability of one-dimensional quasi-exactly solvable Schrödinger operators, *Communications in Mathematical Physics* **153** (1993), 117-146
- [Gon 94] González-López, A.; Kamran, N.; Olver, P.J. (1994): Quasi-exact Solvability, *Cont. Math.* **160** AMS (1994) 113-140
- [Gra 72] Grawert, G.: *Quantenmechanik in Anwendungen und Übungen*, Frankfurt a. M.: Akademische Verlagsgesellschaft, 1972
- [Saa 06] Saad, N.; Hall, R.L.; Ciftci, H. (2006): Sextic anharmonic oscillators and orthogonal polynomials, *J. Phys. A: Math. Gen.* **39** (2006) 8477-8486
- [Tat 87] Tater, M. (1987): The Hill determinant method in application to the sextic oscillator: limitations and improvement, *J. Phys. A: Math. Gen.* **20** (1987) 2483-2495
- [Zno 00] Znoji, M. (2000): Quasi-exactly solvable quartic potentials with centrifugal and Coulombic terms, *J. Phys. A: Math. Gen.* **33** (2000) 4203-4211

Alle gezeigten Abbildungen wurden mit dem Programm *Wolfram Mathematica 7.0* erstellt. Auch die angegebenen Normierungskonstanten  $N$  wurden über dieses Programm berechnet.

## Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich diese Bachelorarbeit selbstständig verfasst habe, dass ich keine anderen Quellen und Hilfsmittel als die angegebenen benutzt und die Stellen der Arbeit, die anderen Quellen dem Wortlaut oder Sinn entnommen sind, in jedem Fall unter Angabe der Quellen als Entlehnung kenntlich gemacht habe.

---

Ort, Datum

---

Jona Dreier

Ich erkläre mich mit einem Abgleich der Arbeit mit anderen Texten zwecks Auffindung von Übereinstimmungen sowie mit einer zu diesem Zweck vorzunehmenden Speicherung der Arbeit in eine Datenbank einverstanden.

---

Ort, Datum

---

Jona Dreier