Anhang B

Maslov-Phase

Bei der semiklassischen Bestimmung der Greenschen Funktion $G(r, r'; E)$ mittels Pfad-integration treten neben der klassischen Wirkung S noch die sogenannten Maslov-Phasen auf. Sie stellen die Verallgemeinerung des „connection problems" der eindimensionalen WKB-Methode auf höherdimensionale Probleme dar [69]. Im allgemeinen ist ihre Bestimmung außerordentlich schwierig. Für separable Systeme, die in eindimensionale Probleme zerfallen, ist die Berechnung der Maslov-Phasen jedoch unproblematisch: Ebenso wie die klassische Wirkung ergibt sich die Maslov-Phase als die Summe der Beiträge der eindimensionalen Bewegungen. Man löst also das eindimensionale „connection problem" an den klassischen Umkehrpunkten und addiert die so gefundenen Phasen.

Das „connection problem" tritt auf, da die WKB-Wellenfunktion

$$\Psi_{WKB}(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x)\,dx - \frac{\pi}{2}\phi_a\right)$$

eines eindimensionalen Systems an den klassischen Umkehrpunkten divergiert. Andererseits wird aber die Phase $\frac{\pi}{2}\phi_a$ durch die Randbedingungen, d.h. durch den Umkehrpunkt a und den dahinterliegenden klassisch verbotenen Bereich, festgelegt. Um die Phase zu bestimmen und somit die Randbedingungen in die Semiklassik einzubauen, löst man das quantenmechanische Problem in der Umgebung des Umkehrpunktes und matcht die so gefundene Wellenfunktion im Gültigkeitsbereich der Semiklassik (d.h. weit genug ab vom Umkehrpunkt a) mit $\Psi_{WKB}(x)$. Ist das betrachtete Potential stetig in a, so kann man es lokal durch ein lineares Potential nähern

$$\Big(V(x) - E\Big)\Big|_{\text{um } x=a} \approx \frac{\hbar^2}{2m} f^3\,(a - x)$$

Dann ist die quantenmechanische Wellenfunktion um a durch eine Airy-Funktion gegeben ([70], (10.4.60)):

$$\Psi(x)\Big|_{\text{um } x=a} \approx \mathrm{Ai}\Big(f(a-x)\Big) \overset{x\to\infty}{\longrightarrow} C\, \frac{\cos\left(\frac{2}{3}\Big(f(x-a)\Big)^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{\pi}\,\Big(f(x-a)\Big)^{1/4}}$$

Überlappt der Bereich, in dem die quantenmechanische Wellenfunktion durch die Asymptotik der Airy-Funktion gut beschrieben wird, mit dem Gültigkeitsbereich der Semiklassik, so findet man wegen

$$p(x)\Big|_{\text{um } x=a} = \hbar\, f^{3/2}\sqrt{x-a} \quad \rightsquigarrow \quad \frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x)\,dx = \frac{2}{3}\Big(f(x-a)\Big)^{3/2}$$

durch Phasenvergleich den Maslov-Index

$$\phi_a = \frac{1}{2} \tag{B.1}$$

Das ist das bekannte WKB-Resultat für stetige Potentiale [71]. Existieren genau zwei Umkehrpunkte a und b, ergibt sich aus der Säkulardeterminante der Matching-Bedingung für die beiden WKB-Wellenfunktionen um a bzw. b die übliche Bohr-Sommerfeldsche Quantisierungsbedingung:

$$n\pi \overset{!}{=} \frac{1}{\hbar}\int_a^b p(x)\,dx - \Big(\phi_a+\phi_b\Big)\frac{\pi}{2} = \frac{1}{2}\underbrace{\Big(S/\hbar - (\phi_a+\phi_b)\pi\Big)}_{\text{vgl. Phase in (4.26)}}$$

$$\rightsquigarrow \oint p(x)\,dx = h\left(n + \frac{\phi_a+\phi_b}{2}\right) = h\Big(n+\frac{1}{2}\Big)$$

Im Falle der uns interessierenden gebundenen Bewegung in einem radialsymmetrischen Potential treten je zwei Umkehrpunkte in der ϑ- und der Radialbewegung auf. Die ϑ-Umkehrpunkte sind allein durch die Drehimpulserhaltung bestimmt. Für sie läßt sich (B.1) anwenden [72]. Der innere Umkehrpunkt der Radialbewegung ist für unsere topfartigen Potentiale ebenfalls durch den Drehimpuls (in Form des Zentrifugalpotentials) bestimmt. Auch hier ist (B.1) gültig. Der Maslov-Index ϕ_{out} am äußeren Umkehrpunkt der Radialbewegung hängt dagegen von der Wahl des Potential-Randes ab. Für eine periodische Bahn (λ,ν) mit λ Umläufen und ν Radial-Oszillationen (vgl. Abschnitt 4.3) finden wir somit die Maslov-Phase $\Big((1/2+\phi_{out})\nu+\lambda\Big)\pi$. Für die Phase in (4.26) ergibt sich damit

$$\varphi_{(\lambda,\nu)} = \Big((1/2+\phi_{out})\nu + \lambda - 1/4\Big)\pi$$

B.1 Äußerer Umkehrpunkt

Betrachten wir einen Potentialtopf (Tiefe V_0 und Radius R_0), so bricht die Näherung, die zu (B.1) führt, offensichtlich zusammen. In diesem Falle können wir den Maslov-Index jedoch direkt aus der quantenmechanischen Streuphase für ebene Wellen an der Potentialschwelle bei R_0 bestimmen. Dazu nähern wir das Zentrifugalpotential in der Umgebung des äußeren Umkehrpunktes durch ein konstantes Potential. Die quantenmechanische Lösung setzt sich dann aus einer ebenen Welle im klassisch erlaubten und einem exponentiell abfallenden Anteil im klassisch verbotenen Bereich zusammen. Den Maslov-Index bestimmen wir wieder durch Phasenvergleich mit der WKB-Wellenfunktion. Bei gegebener Energie E und Drehimpuls L finden wir

$$\frac{\pi}{2}\,\phi_{out} = \arctan\left(\frac{\kappa_r}{k_r}\right) = \frac{\pi}{2} - \arcsin(P_L) \tag{B.2}$$

wobei wir die Abkürzungen

$$k_r := \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} - \frac{L^2}{\hbar^2 R_0^2}} \qquad \kappa_r := \sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2} + \frac{L^2}{\hbar^2 R_0^2}} \qquad P_L = P\sqrt{1-\hat{L}^2} \tag{B.3}$$

sowie im letzten Ausdruck $P = \sqrt{\frac{E+V_0}{V_0}}$ und $\hat{L} = L/(pR_0)$ (vgl. Abschnitt 6.1) verwendet haben. Im Limes $V_0 \to \infty$ bei konstantem Impuls $p = \sqrt{2m(E+V_0)}$ (d.h. $P \to 0$) erhält man daraus $\phi_{out} = 1$. Damit finden wir für die Bahn (λ, ν) in einer sphärischen Kavität

$$\varphi_{(\lambda,\nu)} = \left(\frac{3}{2}\nu + \lambda - \frac{1}{4}\right)\pi \tag{B.4}$$

Die Berechnung der Maslov-Phase für den äußeren Umkehrpunkt in einem Woods-Saxon Potential ist schwieriger. Zunächst bestimmen wir die quantenmechanische Streuphase an einem Woods-Saxon Potential. Dazu gehen wir von der radialen Schrödinger-Gleichung aus

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u''(r) - \left(\frac{V_0}{1+e^{(r-R_0)/\alpha}} - \frac{L^2}{2mr^2}\right)u(r) = E\,u(r)$$

Wir setzen das Zentrifugalpotential in der Umgebung von R_0 wieder konstant. Dann ergibt sich mittels der Abkürzungen (B.3)

$$u''(r) + \left(k_r^2 - \frac{k_r^2+\kappa_r^2}{1+e^{-(r-R_0)/\alpha}}\right)u(r) = 0$$

In Anlehnung an [71] (§25, Aufgabe 3) transformieren wir auf die Variable $z = -e^{-(r-R_0)/\alpha}$ und bauen die Randbedingung für $r \to \infty$ mittels $u(z) = e^{-\kappa_r(r-R_0)}w(z)$ in die radiale Wellenfunktion ein. Dieser Ansatz führt auf eine hypergeometrische Differentialgleichung

$$z(1-z)\,w''(z) + \Big(c - (a+b+1)z\Big)\,w'(z) - ab\,w(z) = 0$$

mit Koeffizienten $a = \alpha(\kappa_r + ik_r)$, $b = \alpha(\kappa_r - ik_r)$ und $c = 1 + \alpha\kappa_r$. Mittels der Transformation ([70] (15.3.7))

$$\begin{aligned} F(a,b;c;z) \;&=\; \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)}(-z)^{-a}\,F\left(a, a+1-c; a+1-b; \frac{1}{z}\right) \\ &\quad + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)}(-z)^{-b}\,F\left(b, b+1-c; b+1-a; \frac{1}{z}\right) \end{aligned}$$

und mit $\lim_{z\to\infty} F(a,b;c;1/z) = 1$ finden wir die Asymptotik der radialen Wellenfunktion im klassisch erlaubten Bereich ($r < R_0$):

$$u(r) \to C_+\,e^{ik_r(r-R_0)} + C_-\,e^{-ik_r(r-R_0)} \qquad \text{für} \quad \frac{R_0 - r}{\alpha} \gg 1$$

Wegen $\overline{c} = c = 1 + a + b$ und $\overline{b} = a$ sind die Koeffizienten

$$C_+ := \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)} \qquad C_- := \frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)}$$

zueinander komplex konjugiert. Wir können also schreiben $C_+ = C\,e^{i\varphi}$ bzw. $C_- = C\,e^{-i\varphi}$ und erhalten damit schließlich

$$u(r) \to C\,\cos\Big(k_r(r - R_0) + \varphi\Big) \tag{B.5}$$

wobei die Phase φ durch

$$\begin{aligned} \varphi \;&=\; \arg\left(\frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)}\right) = \arg\Gamma(c) + \arg\Gamma(b-a) - \arg\Gamma(b) - \arg\Gamma(1+b) \\ &=\; \arg\Gamma(-2i\alpha k_r) - 2\arg\Gamma\Big(\alpha(\kappa_r - ik_r)\Big) - \arctan\left(-\frac{k_r}{\kappa_r}\right) \end{aligned} \tag{B.6}$$

gegeben ist.

Um die Maslov-Phase zu bestimmen, müssen wir (B.5) mit der WKB-Wellenfunktion

$$\Psi_{WKB}(r) \propto \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_r^{r_{out}} p(r)\,dr - \frac{\pi}{2}\,\phi_{out}\right) \tag{B.7}$$

vergleichen. Das benötigte Wirkungsintegral können wir explizit berechnen

$$\begin{aligned}
\int_r^{r_{out}} p(r)\,dr &= \int_r^{r_{out}} \sqrt{2m\left(E + \frac{V_0}{1+e^{(r-R_0)/\alpha}}\right) - \frac{L^2}{R_0^2}}\,dr \\
&= pR_0 \int_{\hat{r}}^{\hat{r}_{out}} \sqrt{1 - \hat{L}^2 - \frac{1+\tanh\left(\frac{x-1}{2\hat{\alpha}}\right)}{2P^2}}\,dx \\
&= pR_0\, 2\hat{\alpha} \left\{ \sqrt{1-\hat{L}^2}\,\mathrm{artanh}\sqrt{\frac{1-\hat{L}^2-1+\tanh\left(\frac{\hat{r}-1}{2\hat{\alpha}}\right)}{1-\hat{L}^2}} \right. \qquad \text{(B.8)} \\
&\quad \left. - \sqrt{\frac{1}{P^2} - (1-\hat{L}^2)}\ \arctan\sqrt{\frac{1-\hat{L}^2-1+\tanh\left(\frac{\hat{r}-1}{2\hat{\alpha}}\right)}{\frac{1}{P^2}-(1-\hat{L}^2)}} \right\}
\end{aligned}$$

Dabei haben wir die Identität (A.5) sowie die Abkürzungen aus Abschnitt 6.1 benutzt. Aus (B.5), (B.6), (B.7) und (B.8) können wir nun die Maslov-Phase für ein Woods-Saxon Potential am äußeren Umkehrpunkt bestimmen. Sind wir jedoch nur an der führenden Ordnung der Maslov-Phase im Limes steiler Woods-Saxon Potentiale ($\alpha \to 0$) interessiert, so vereinfacht sich das Resultat ungemein (vgl. Abschnitt A.1). Die klassische Wirkung (B.8) reduziert sich für $r < R_0$ dann zu

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\hbar}\int_r^{r_{out}} p(r)\,dr &= kR_0\,2\hat{\alpha}\left\{\sqrt{1-\hat{L}^2}\,\frac{1-\hat{r}}{2\hat{\alpha}} + \frac{1}{2}\,\hat{I}_s(P,\hat{L}) + \mathcal{O}(\hat{\alpha})\right\} \\
&= k_r(R_0 - r) + \hat{I}_s(P,\hat{L})\,k\alpha + \mathcal{O}(\alpha^2)
\end{aligned}$$

Durch Vergleich von (B.7) und (B.5) folgt daraus für die Maslov-Phase

$$\frac{\pi}{2}\,\phi_{out} = \varphi + \hat{I}_s(P,\hat{L})\,k\alpha + \mathcal{O}(\alpha^2)$$

Um auch die quantenmechanische Streuphase nach α zu entwickeln, verwenden wir die Formel

$$\arg\Gamma(z) = -\arg(z) - \arg(z+1) + (1-\gamma)\,\Im(z) + \mathcal{O}(z^2)$$

die sich aus $\ln\Gamma(1+z) = -\ln(1+z) + (1-\gamma)\,z + \mathcal{O}(z^2)$ (siehe [70] (6.1.33)) ergibt[1]. Wir finden, daß sich die Terme linear in α gegenseitig kompensieren:

$$\boxed{\varphi = \frac{\pi}{2} - \arcsin(P_L) + \mathcal{O}(\alpha^2)} \qquad \text{(B.9)}$$

Die Streuphase für ein steiles Woods-Saxon Potential stimmt also bis $\mathcal{O}(\alpha^2)$ mit (B.2) überein.

[1] γ bezeichnet die Eulersche Konstante.

In führender Ordnung ist der Maslov-Index für die Bahn (λ, ν) in einem Woods-Saxon Potential mit steilem Rand α also durch denselben Ausdruck gegeben, der sich für einen Potentialtopf gleicher Tiefe ergibt:

$$\boxed{\varphi_{(\lambda,\nu)} = \left[\left(\frac{3}{2} - \frac{2}{\pi}\,\arcsin(P_L)\right)\nu + \lambda - \frac{1}{4}\right]\pi} \tag{B.10}$$