



Resonanzen in der Quantenmechanik und ihre Beziehungen zur QCD

von

Johann Schneider

Bachelorarbeit

vorgelegt dem Fachbereich Physik
der Goethe-Universität,
Frankfurt am Main

am 25. September 2014

1. Gutachter: Prof. Dr. Marc Wagner
2. Gutachter: Dr. Francesco Giacosa

Selbstständigkeitserklärung

Erklärung nach § 28 (12) Ordnung für den Bachelor- und den Masterstudiengang

Hiermit erkläre ich, dass ich die Arbeit selbstständig und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Quellen und Hilfsmittel verfasst habe. Alle Stellen der Arbeit, die wörtlich oder sinngemäß aus Veröffentlichungen oder aus anderen fremden Texten entnommen wurden, sind von mir als solche kenntlich gemacht worden. Ferner erkläre ich, dass die Arbeit nicht - auch nicht auszugsweise - für eine andere Prüfung verwendet wurde.

Frankfurt am Main, 24.09.2014

Johann Schneider

In dieser Arbeit werden Eigenschaften von Resonanzen an einem eindimensionalen, quantenmechanischen Problem untersucht. Hierzu wird die Schrödingergleichung mit der Shooting-Methode numerisch gelöst und das Energiespektrum des Systems in Abhängigkeit einer räumlichen Periode berechnet. Die prinzipielle Vorgehensweise zur Berechnung von Resonanzmasse und Lebensdauer wird anhand der Lüscher-Methode präsentiert. Zudem werden Gitterrechnungen am quantenmechanischen Problem durchgeführt und die Schwierigkeiten dabei verdeutlicht.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theorie	2
2.1	Resonanzen in der QCD	2
2.1.1	Energiedifferenzen aus Korrelationsfunktionen	3
2.1.2	Grundzustandsenergie aus Pfadintegralerwartungswerten	5
2.2	Resonanzen in der QM	7
2.2.1	Vergleich mit dem harmonischem Potential	8
2.2.2	Parität und Streuphase bei Resonanzen	9
2.3	Lüscher-Methode in 1D	11
3	Numerische Methoden	15
3.1	Shooting-Methode mit Mathematica	15
3.2	Histogramm-Methode	17
3.3	Gitterrechnungen	18
4	Auswertung und Ergebnisse	21
4.1	Resonanzen am Potential $V^{(1)}$	21
4.2	Resonanzen am Potential $V^{(2)}$	26
5	Zusammenfassung und Ausblick	30
	Literaturverzeichnis	30

1 Einleitung

Der Begriff *Resonanz* kann in verschiedenen Bereichen der Physik angetroffen werden. In der **Quanten-Chromo-Dynamik** versteht man unter einer Resonanz einen gebundenen Zustand aus Teilchen, welcher nach einer bestimmten Zeit zerfällt. Relevante physikalische Größen wie Masse und Lebensdauer von Resonanzen lassen sich mit Simulationen in der Gitter-QCD ermitteln. In der vorliegenden Arbeit werden die Eigenschaften von Resonanzen und die zur Erforschung verwendeten Methoden anhand eines eindimensionalen, quantenmechanischen Problems, welches [1] entnommen wurde, untersucht.

Das Verfahren zur Bestimmung von Resonanzmasse und Lebensdauer ist die Lüscher-Methode. Hierfür wird der Raum periodisiert und das Spektrum der Energieniveaus des betrachteten Systems in Abhängigkeit der Periodenlänge benötigt.

In der **Quanten-Mechanik** kann dies durch Lösen der Schrödingergleichung berechnet werden. Desweiteren wird das Problem mit Methoden, welche in der Gitter-QCD verwendet werden, behandelt und die wesentlichen Schwierigkeiten dabei, durch Vergleich mit den Verfahren aus der QM, hervorgehoben.

Die in [1] aufgeführten Ergebnisse werden reproduziert und ein weiteres, dort vorgestelltes Verfahren zur Ermittlung von Resonanzmassen aus dem Energiespektrum, welches hier als “Histogramm-Methode” bezeichnet wird, angewendet.

Die Arbeit ist folgendermaßen strukturiert:

Zunächst wird in Kapitel 2 erläutert, welche Bedeutung eine Resonanz in der QCD und der QM hat, was diese charakterisiert und wie das Energiespektrum $E(L)$, wobei L die Periode des eindimensionalen Raumes bezeichnet, berechnet werden kann. Zudem wird das quantenmechanische Problem harmonisch genähert und Überlegungen zu Parität und Streuphase von Resonanzen angestellt. Anschließend wird die Lüscher-Methode in einer Dimension hergeleitet. Die hier verwendeten Herleitungen und Überlegungen beruhen auf [1, 2, 3, 4, 5].

In Kapitel 3 wird die Shooting-Methode, mit welcher die Schrödingergleichung numerisch gelöst werden kann, die Histogramm-Methode und Rechnungen auf dem Gitter eingeführt. Die Grundlagen hierfür stammen aus [1, 6, 7].

In Kapitel 4 werden die Ergebnisse präsentiert und ausgewertet. Abschließend wird in Kapitel 5 eine Zusammenfassung und ein Ausblick gegeben.

Es werden durchgehend die natürlichen Einheiten

$$c = 1, \quad \hbar = 1$$

verwendet. Da es in dieser Arbeit um Konzepte und nicht um deren Anwendungen auf physikalische Beispiele geht, ist die einheitenlose Masse als Parameter nicht relevant und wird an entsprechenden Stellen

$$m = 1$$

gesetzt.

2 Theorie

2.1 Resonanzen in der QCD

Die QCD ist die Theorie der starken Wechselwirkung. Es handelt sich hierbei um eine Quantenfeldtheorie, welche die Wechselwirkung zwischen Quarks mithilfe von Austauschpartikeln, den Gluonen, beschreibt. Die Quarks bilden Hadronen wie zum Beispiel das Neutron und das Proton, aus welchen die Atomkerne bestehen. Extrem kurzlebige Hadronen, die unter der starken Wechselwirkung in andere Hadronen zerfallen, bilden angeregte hadronische Zustände, welche man als *Resonanzen* bezeichnet. Diese entstehen bei Streuexperimenten, wenn die Schwerpunktsenergie dazu ausreicht. Im elastischen Fall mit zwei Hadronen H_1 und H_2 sieht dies wie folgt aus [8]:

$$H_1 H_2 \rightarrow R \rightarrow H_1 H_2. \quad (2.1)$$

Im Wirkungsquerschnitt ist dann ein Maximum zu finden, welches den Verlauf einer Breit-Wigner Funktion aufweist.

Ein solcher Streuprozess kann nicht mit Störungstheorie behandelt werden, da bereits für die Beschreibung von Hadronen die Kopplungskonstante der starken Wechselwirkung nicht klein genug ist. Dies macht die Behandlung von Resonanzen in der QCD, vor allem die Bestimmung ihrer Lebensdauer, schwierig. Eine nicht störungstheoretische Methode bietet die *Gitter-QCD*, bei der für die Berechnung von Vakuumerwartungswerten der Pfadintegralformalismus auf einer diskretisierten Raumzeit verwendet wird. Die Pfadintegrale können dann mit numerischen Verfahren wie Monte-Carlo Simulationen berechnet werden.

In dieser Arbeit wird aber keine Resonanz in der QCD untersucht, sondern ein rein quantenmechanisches System mit Methoden, welche in der QCD angewendet werden, behandelt.

2.1.1 Energiedifferenzen aus Korrelationsfunktionen

Der Erwartungswert im Vakuumzustand $|\Omega\rangle$, welcher in der QM dem Grundzustand entspricht, sieht in einer Dimension im allgemeinsten Fall folgendermaßen aus [6]:

$$\langle\Omega|\hat{T}\{\hat{O}_j(\hat{x}(t_j))\dots\hat{O}_1(\hat{x}(t_1))\}|\Omega\rangle = \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} Dx O_j(x(t_j))\dots O_1(x(t_1)) e^{-S_E[x]} \quad (2.2)$$

mit

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} Dx e^{-S_E[x]}. \quad (2.3)$$

Hierbei ist $\hat{T}\{\dots\}$ der Zeitordnungsoperator, welcher das Produkt von Operatoren gemäß ihrer Zeit absteigend von links nach rechts anordnet und

$$S_E[x] = \int_{-\infty}^{\infty} dt \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + V(x) \right) \quad (2.4)$$

die euklidische Wirkung. Die hier verwendete Zeit ist also die euklidische Zeit. Die \hat{O}_i können beliebige Operatoren sein, welche vom Ortsoperator \hat{x} abhängen. Der Ausdruck

$$\int_{-\infty}^{\infty} Dx = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_t dx(t) \quad (2.5)$$

ist das "Integral über alle möglichen Pfade" $x(t)$ [4].

Die folgende Form der Korrelationsfunktion (2.2), welche 2-Punkt-Funktion genannt wird, ermöglicht die Bestimmung von Differenzen von Energiewerten zwischen einem angeregten Zustand und dem Grundzustand [6]:

$$c(t) = \langle\Omega|\hat{O}(\hat{x}(t))\hat{O}(\hat{x})|\Omega\rangle = \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} Dx O(x(t))O(x) e^{-S_E[x]}. \quad (2.6)$$

Hierbei wurde $\hat{x} = \hat{x}(0)$ abgekürzt und es gilt: $t > 0$.

Mit der euklidischen Zeitentwicklung

$$\hat{O}(\hat{x}(t)) = e^{\hat{H}t}\hat{O}(\hat{x})e^{-\hat{H}t} \quad (2.7)$$

ergibt sich daraus:

$$\begin{aligned} c(t) &= \langle\Omega|e^{\hat{H}t}\hat{O}(\hat{x})e^{-\hat{H}t}\hat{O}(\hat{x})|\Omega\rangle \\ &= \sum_n \langle\Omega|e^{\hat{H}t}\hat{O}(\hat{x})|n\rangle \langle n|e^{-\hat{H}t}\hat{O}(\hat{x})|\Omega\rangle \\ &= \sum_n e^{E_\Omega t} e^{-E_n t} \langle\Omega|\hat{O}(\hat{x})|n\rangle \langle n|\hat{O}(\hat{x})|\Omega\rangle \\ &= \sum_n e^{-(E_n - E_\Omega)t} |\langle\Omega|\hat{O}(\hat{x})|n\rangle|^2, \end{aligned} \quad (2.8)$$

wobei E_n die Energie des n -ten Zustandes und E_Ω die Grundzustandsenergie bezeichnet. Aus der QM weiß man, dass der Grundzustand immer positive Parität ($P\{|\Omega\rangle\} = +$) hat, was im nächsten Unterkapitel erläutert wird. Dies hat zur Folge, dass

$$\langle \Omega | \hat{O}(\hat{x}) | n \rangle \begin{cases} = 0 & \text{falls } P\{\hat{O}(\hat{x})|n\rangle\} = - \\ \neq 0 & \text{falls } P\{\hat{O}(\hat{x})|n\rangle\} = + \end{cases}, \quad (2.9)$$

da Zustände mit unterschiedlichen Paritäten orthogonal zueinander sind. Je nachdem welcher Operator $\hat{O}(\hat{x})$ gewählt wird, lässt sich die Summe in (2.8) weiter vereinfachen. Um die Energiedifferenz zwischen dem niedrigsten Zustand negativer Parität, E_0^- , eines Systems mit periodischem Ort, wie es für die Lüscher-Methode benötigt wird (Abschnitt 2.3), und dem Grundzustand zu erhalten, wählt man den Operator folgendermaßen:

$$\hat{O}(\hat{x}(t)) = \sin\left(\hat{x}(t)\frac{2\pi}{L}\right). \quad (2.10)$$

Dieser erzeugt, angewendet auf $|\Omega\rangle$ einen Zustand negativer Parität und weist ebenfalls die L -Periodizität auf. Wegen (2.9) tragen zur Summe (2.8) nur Zustände $|n\rangle$ mit $P\{|n\rangle\} = -$ bei. Für große Zeiten ergibt sich:

$$\begin{aligned} c_0^-(t) &= \sum_{n, P\{|n\rangle\}=-} e^{-(E_n - E_\Omega)t} \left| \langle \Omega | \sin\left(\hat{x}\frac{2\pi}{L}\right) | n \rangle \right|^2 \\ &\stackrel{t \rightarrow \infty}{\approx} e^{-(E_0^- - E_\Omega)t} \left| \langle \Omega | \sin\left(\hat{x}\frac{2\pi}{L}\right) | 0^- \rangle \right|^2 + \mathcal{O}\left(e^{-(E_1^- - E_\Omega)t}\right) \\ &\approx e^{-(E_0^- - E_\Omega)t} \cdot \text{const.} \end{aligned} \quad (2.11)$$

Aus dem exponentiellen Abfall der 2-Punkt-Funktion für große Zeiten lässt sich also die Differenz zwischen der Energie des niedrigsten Zustands negativer Parität und der Grundzustandsenergie ermitteln.

Analog erhält man die Energiedifferenz zum niedrigsten angeregten Zustand positiver Parität, E_1^+ , wenn man als Operator

$$\hat{O}(\hat{x}(t)) = \cos\left(\hat{x}(t)\frac{2\pi}{L}\right) \quad (2.12)$$

wählt, welcher, angewendet auf $|\Omega\rangle$ einen Zustand mit positiver Parität erzeugt. In der Summe (2.8) bleiben somit nur Zustände $|n\rangle$ mit $P\{|n\rangle\} = +$ übrig. Für die entsprechende 2-Punkt-Funktion erhält man dann für $t \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} c_1^+(t) &\stackrel{t \rightarrow \infty}{\approx} \left| \langle \Omega | \cos\left(\hat{x}\frac{2\pi}{L}\right) | \Omega \rangle \right|^2 + e^{-(E_1^+ - E_\Omega)t} \left| \langle \Omega | \cos\left(\hat{x}\frac{2\pi}{L}\right) | 1^+ \rangle \right|^2 + \mathcal{O}\left(e^{-(E_2^+ - E_\Omega)t}\right) \\ &\approx \text{const}1 + e^{-(E_1^+ - E_\Omega)t} \cdot \text{const}2. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Hierbei gilt: $|\Omega\rangle = |0^+\rangle$.

2.1.2 Grundzustandsenergie aus Pfadintegralerwartungswerten

Mit der Korrelationsfunktion (2.2) lässt sich auch die Grundzustandsenergie E_Ω berechnen. Hierfür wird ein Operator $\hat{\mathcal{O}}(\hat{x})$ benötigt, der nach Anwendung des Zeitordnungsoperators \hat{T} den Hamiltonoperator ergibt, so dass das Pfadintegral zur Berechnung verwendet werden kann:

$$E_\Omega = \langle \Omega | \hat{H} | \Omega \rangle \stackrel{!}{=} \langle \Omega | \hat{T} \{ \hat{\mathcal{O}}(\hat{x}(t)) \} | \Omega \rangle = \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} Dx \mathcal{O}(x(t)) e^{-S_E[x]}. \quad (2.14)$$

Um den Operator anzugeben, wird an dieser Stelle vorgegriffen und der Gitterabstand a eingeführt, mit welchem die Zeit in einer Gitterrechnung diskretisiert wird (Abschnitt 3.3). Mit der Wahl

$$\hat{\mathcal{O}}(\hat{x}(t)) = \frac{1}{2a} - \frac{m}{2} \left(\frac{\hat{x}(a) - \hat{x}}{a} \right)^2 + \hat{V}(\hat{x}(t)) \quad (2.15)$$

wird die oben genannte Bedingung (2.14) für $a \rightarrow 0$ erfüllt. Um dies zu beweisen, müssen zunächst einige Relationen hergeleitet werden.

Mit der euklidischen Zeitentwicklung gilt für kleine a :

$$\begin{aligned} \hat{x}(a) &= e^{\hat{H}a} \hat{x} e^{-\hat{H}a} \\ &= \left(\hat{1} + \hat{H}a + \frac{1}{2}(\hat{H}a)^2 + \mathcal{O}(a^3) \right) \hat{x} \left(\hat{1} - \hat{H}a + \frac{1}{2}(\hat{H}a)^2 + \mathcal{O}(a^3) \right) \\ &= \hat{x} + \hat{H}a\hat{x} - \hat{x}\hat{H}a + \frac{1}{2}(\hat{H}a)^2\hat{x} + \frac{1}{2}\hat{x}(\hat{H}a)^2 - \hat{H}a\hat{x}\hat{H}a + \mathcal{O}(a^3) \\ &= \hat{x} + a(\hat{H}\hat{x} - \hat{x}\hat{H}) + \frac{1}{2}a^2(\hat{H}^2\hat{x} + \hat{x}\hat{H}^2 - 2\hat{H}\hat{x}\hat{H}) + \mathcal{O}(a^3) \\ &= \hat{x} + a[\hat{H}, \hat{x}] + \frac{1}{2}a^2(\hat{H}[\hat{H}, \hat{x}] + [\hat{x}, \hat{H}]\hat{H}) + \mathcal{O}(a^3) \\ &= \hat{x} + a[\hat{H}, \hat{x}] + \frac{1}{2}a^2[\hat{H}, [\hat{H}, \hat{x}]] + \mathcal{O}(a^3), \end{aligned} \quad (2.16)$$

wobei $[\cdot, \cdot]$ den Kommutator bezeichnet. Um die Rechnung fortzuführen, setzt man den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x}) \quad (2.17)$$

ein, nutzt die bekannten Kommutatorrelationen zwischen Ort und Impuls, $[\hat{x}, \hat{p}] = i$, aus und erhält

$$\hat{x}(a) = \hat{x} - i\frac{a\hat{p}}{m} - i\frac{a^2}{2m}[\hat{H}, \hat{p}] + \mathcal{O}(a^3). \quad (2.18)$$

Über den Kommutator

$$[\hat{H}, \hat{p}] = [\hat{V}(\hat{x}), \hat{p}] \quad (2.19)$$

weiß man mit der Taylorentwicklung

$$\hat{V}(\hat{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n \hat{V}}{d\hat{x}^n} \Big|_{\hat{x}=0} \hat{x}^n, \quad (2.20)$$

dass dieser, je nach Potential, verschwindet, konstant oder proportional zu \hat{x}^l mit $l \in \mathbb{N}$ ist. Somit verschwindet der dritte Term in (2.18), ist ebenfalls konstant oder hat dieselbe Proportionalität und ist daher für den folgenden Kommutator irrelevant:

$$\begin{aligned} [\hat{x}(a), \hat{x}] &\stackrel{(2.18)}{=} \left[\hat{x} - i \frac{a\hat{p}}{m} - i \frac{a^2}{2m} [\hat{H}, \hat{p}] + \mathcal{O}(a^3), \hat{x} \right] \\ &= -i \frac{a}{m} [\hat{p}, \hat{x}] + \mathcal{O}(a^3) \\ &= -\frac{a}{m} + \mathcal{O}(a^3). \end{aligned} \quad (2.21)$$

Als letztes wird folgende Relation benötigt:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hat{x}(a) - \hat{x}}{a} \right)^2 &\stackrel{(2.18)}{=} \left(\frac{-i \frac{a\hat{p}}{m} + \mathcal{O}(a^2)}{a} \right)^2 \\ &= -\frac{\hat{p}^2}{m^2} + \mathcal{O}(a). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Der Beweis, dass (2.15) die Bedingung (2.14) erfüllt, kann nun folgendermaßen geführt werden:

$$\begin{aligned} &\langle \Omega | \hat{T} \left\{ \frac{1}{2a} - \frac{m}{2} \left(\frac{\hat{x}(a) - \hat{x}}{a} \right)^2 + \hat{V}(\hat{x}) \right\} | \Omega \rangle \\ &= \langle \Omega | \frac{1}{2a} - \frac{m}{2a^2} \hat{T} \{ (\hat{x}(a) - \hat{x})^2 \} + \hat{V}(\hat{x}) | \Omega \rangle \\ &= \langle \Omega | \frac{1}{2a} - \frac{m}{2a^2} \hat{T} \{ \hat{x}(a)^2 + \hat{x}^2 - \hat{x}(a)\hat{x} - \hat{x}\hat{x}(a) \} + \hat{V}(\hat{x}) | \Omega \rangle \\ &= \langle \Omega | -\frac{m}{2a^2} \left(\hat{x}(a)^2 + \hat{x}^2 - 2\hat{x}(a)\hat{x} - \frac{a}{m} \right) + \hat{V}(\hat{x}) | \Omega \rangle \\ &\stackrel{(2.21)}{=} \langle \Omega | -\frac{m}{2a^2} (\hat{x}(a)^2 + \hat{x}^2 - \hat{x}(a)\hat{x} - \hat{x}\hat{x}(a) + \mathcal{O}(a^3)) + \hat{V}(\hat{x}) | \Omega \rangle \\ &= \langle \Omega | -\frac{m}{2a^2} (\hat{x}(a) - \hat{x})^2 + \hat{V}(\hat{x}) | \Omega \rangle + \mathcal{O}(a) \\ &\stackrel{(2.22)}{=} \langle \Omega | \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x}) | \Omega \rangle + \mathcal{O}(a) \\ &= \langle \Omega | \hat{H} | \Omega \rangle + \mathcal{O}(a) \end{aligned}$$

□

2.2 Resonanzen in der QM

In der QM kommen Resonanzen im Zusammenhang mit Streuung von Teilchen an Potentialen vor. Das Teilchen wird hierbei als Wellenpaket beschrieben, welches von links oder rechts auf das Potential $V(x)$ einfällt und ein bestimmter Anteil reflektiert und transmittiert wird. Das Wellenpaket kann über Fourieranalyse in ein Spektrum von ebenen Wellen zerlegt werden, welche jeweils einzeln an dem Potential streuen. Es reicht also aus, die Streuung einer ebenen Welle am Potential zu untersuchen.

Im Folgenden wird das Potential aus [1],

$$V^{(1)}(x) = (x^4 - 3)e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad (2.23)$$

betrachtet, welches bereits einheitenlos ist. Es ist offensichtlich symmetrisch ($V(-x) = V(x)$) und verschwindet für $|x| \rightarrow \infty$ (Abb. 1).

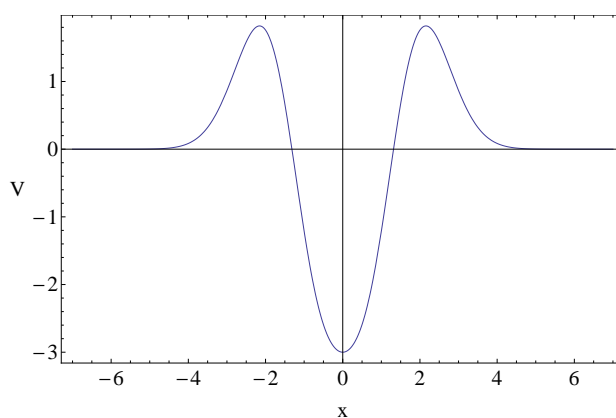


Abbildung 1: Potential (2.23). Es ist attraktiv für $|x| < \sqrt{2 + \sqrt{7}}$ und abstoßend für $|x| > \sqrt{2 + \sqrt{7}}$.

Für solche Potentiale können gebundene Zustände mit $E < 0$ und Streuzustände mit $E > 0$, wobei E die Energie des Systems, also einen Energieeigenwert des Hamiltonoperators bezeichnet, existieren. Die gebundenen Zustände haben diskrete Energiewerte und es existieren endlich viele, je nachdem wie tief das Potential ist. Sie sind im eindimensionalen Fall nicht entartet und können durch reelle symmetrische oder antisymmetrische Wellenfunktionen dargestellt werden. Hierbei gilt, dass die symmetrische Wellenfunktion zu einem Zustand mit positiver Parität und entsprechend die antisymmetrische zu einem mit negativer Parität gehört, wobei sich die Parität mit zunehmender Energie abwechselt. Die Wellenfunktionen der Bindungszustände sind lokalisiert und verschwinden weit außerhalb des Potentials. Zudem kann gezeigt werden, dass der Grundzustand immer gerade ist und bei beliebiger Tiefe des Potentials existiert, wohingegen der erste angeregte Zustand erst ab einer bestimmten Potentialtiefe auftritt.

Hingegen können Streuzustände nicht reell gewählt werden und sind auch ausserhalb des Potentials nicht verschwindend. Die Energieeigenwerte von Streuzuständen sind kontinuierlich und jeweils zweifach entartet. Die Entartung kommt zustande, da aufgrund der Symmetrie des Potentials die Wellenfunktion für den Fall, dass das Teilchen von links einfällt (ψ_L), dieselbe Energie hat wie für den Fall, dass es von rechts einfällt (ψ_R). Eine allgemeine Lösung (ψ) für Streuzustände ist deshalb eine Linearkombination aus beiden Fällen.

Eine relevante Größe bei der Streuung ist die Transmissionsamplitude $S(E)$, welche dem Verhältnis von den Amplituden der einfallenden und der transmittierten Welle entspricht. Das Betragsquadrat $T = |S(E)|^2$ ist der Transmissionskoeffizient, welcher die Wahrscheinlichkeit für die Transmission des Teilchens angibt. Streuzustände mit

$$T = |S(E)|^2 = 1, \quad (2.24)$$

was dem Maximum des Transmissionskoeffizienten entspricht, werden *Resonanzen* genannt. Betrachtet man wieder das Wellenpaket, welches von links einfällt, ergibt die Untersuchung des Schwerpunktes des Wellenpaketes, dass es sich eine bestimmte Zeit lang, welche der Lebensdauer τ der Resonanz entspricht, im attraktiven Innern des Potentials befindet, bevor es aufgrund der positiven Energie das Potential verlässt.

Auch unter der Lösungswellenfunktion ψ zu einem Resonanzzustand kann man sich ein Teilchen vorstellen, welches sich im Potential aufhält und dann zerfällt. Der Zerfall kann mithilfe des Tunneffekts verstanden werden, bei dem das Teilchen mit bestimmter Wahrscheinlichkeit durch die Potentialwände hindurchtunnelt und den attraktiven Kern verlassen kann. Eine Resonanz kann also als quasigebundener Zustand angesehen werden. Die hier aufgezählten Eigenschaften von Resonanzen in der QM können in [2] nachgelesen werden. Dort wird anhand des Potentialtopfes gezeigt, dass die Resonanzenergien eines endlich tiefen Potentialtopfes mit den Energien der Bindungszustände des unendlich tiefen Topfes übereinstimmen. Diese Eigenschaft lässt sich unter Verwendung des harmonischen Potential näherungsweise auch auf das hier betrachtete übertragen.

2.2.1 Vergleich mit dem harmonischem Potential

Eine Abschätzung der Energieeigenwerte für die gebundenen Zustände und die Resonanzen ist durch den Vergleich des Potentials (2.23) mit dem harmonischen Potential

$$V_{harm}(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 - 3 \quad (2.25)$$

möglich. Hierfür setzt man $m = 1$ und skaliert das harmonische Potential mittels ω passend. Ein Vergleich mit der Taylorentwicklung (V_T) von (2.23) liefert:

$$V_T(x) = \frac{3}{2}x^2 - 3 + \mathcal{O}(x^3) \quad \Rightarrow \quad \omega = \sqrt{3}. \quad (2.26)$$

Die Energiewerte und die Wellenfunktionen erhält man nun aus der bekannten analytischen Lösung des harmonischen Potentials.

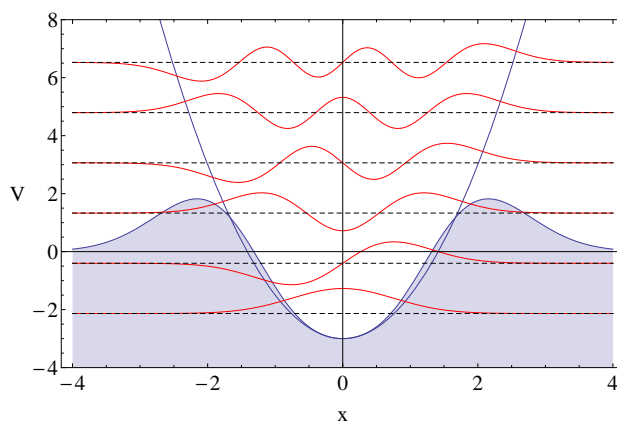


Abbildung 2: An (2.23) angepasstes harmonisches Potential mit Energieeigenwerten und Wellenfunktionen.

2.2.2 Parität und Streuphase bei Resonanzen

Streuzustände und somit auch Resonanzen, können im unendlich ausgedehnten Raum so gewählt werden, dass sie, wie die Bindungszustände, eine definierte Parität aufweisen. Im Folgenden wird dies für den Fall einer Resonanz vorgeführt. Relativ einfach ist es auch für den endlich tiefen Potentialtopf herzuleiten mit Formeln aus [2, S.81 ff.]. Für den allgemeinen Fall eines Streuzustandes mit einem beliebigen Potential hat es sich jedoch als aufwendig herausgestellt und wird hier nicht durchgeführt.

Da es sich bei Streuzuständen im ausgedehnten Raum um Energieeigenzustände handelt, ist ihre Zeitentwicklung durch einen exponentiellen Faktor bestimmt. Wegen des Separationsansatzes ist es dann ausreichend eine Lösung der stationären Schrödingergleichung zu suchen. Nimmt man als Streulösung für $|x| \rightarrow \infty$ jeweils von links oder rechts einfallende ebene Wellen

$$\psi_{L, \text{ein}}(x) = Ae^{ikx}, \quad \psi_{R, \text{ein}}(x) = Ae^{-ikx} \quad (2.27)$$

mit der Amplitude A und dem Wellenvektor k an, so sehen die auslaufenden Wellen folgendermaßen aus:

$$\psi_{L, \text{aus}}(x) = S(E) \cdot Ae^{ikx}, \quad \psi_{R, \text{aus}}(x) = S(E) \cdot Ae^{-ikx}. \quad (2.28)$$

Die komplette Streuinformation steckt also in der Streuamplitude $S(E)$. Diese ist im Allgemeinen komplex, so dass man

$$S(E) = |S(E)|e^{i2\delta(E)} \quad (2.29)$$

schreiben kann. $\delta(E)$ ist hierbei eine reelle Phase und der Faktor 2 für spätere Vereinfachungen definiert. Für Resonanzen gilt nun wegen (2.24):

$$S(E) = e^{i2\delta(E)}. \quad (2.30)$$

Der Unterschied zwischen einlaufender und auslaufender Welle eines Resonanzzustandes liegt somit nur in der Phase, welche nun die Information über die Streuung an dem betrachteten Potential enthält. Man bezeichnet $\delta(E)$ als *Streuphase*.

Wie bereits erwähnt, ist ein Resonanzzustand zweifach entartet und die allgemeine Lösung eine Linearkombination:

$$\psi(x) = c_1\psi_L(x) + c_2\psi_R(x) \quad (2.31)$$

mit $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$. Weit entfernt vom Potential sind mit (2.27), (2.28) und (2.30) folgende Linearkombinationen mit definierter Parität möglich:

$$\psi_+ = \begin{cases} \frac{A}{2} (e^{ikx} + e^{-i(kx-2\delta_+(E))}) = Ae^{i\delta_+(E)} \cos(kx - \delta_+(E)) & \text{für } x \ll 0 \\ \frac{A}{2} (e^{i(kx+2\delta_+(E))} + e^{-ikx}) = Ae^{i\delta_+(E)} \cos(kx + \delta_+(E)) & \text{für } x \gg 0 \end{cases} \quad (2.32)$$

und

$$\psi_- = \begin{cases} \frac{A}{2} (e^{ikx} - e^{-i(kx-2\delta_-(E))}) = Aie^{i\delta_-(E)} \sin(kx - \delta_-(E)) & \text{für } x \ll 0 \\ \frac{A}{2} (e^{i(kx+2\delta_-(E))} - e^{-ikx}) = Aie^{i\delta_-(E)} \sin(kx + \delta_-(E)) & \text{für } x \gg 0. \end{cases} \quad (2.33)$$

Dies kann folgendermaßen zusammengefasst werden:

$$\begin{aligned} \psi_+(x) &= \underbrace{c_+(E)}_{=Ae^{i\delta_+(E)}} \cos(k|x| + \delta_+(E)) \\ \psi_-(x) &= \underbrace{c_-(E)}_{=Aie^{i\delta_-(E)}} \operatorname{sgn}(x) \sin(k|x| + \delta_-(E)) \end{aligned} \quad \text{für } |x| \rightarrow \infty. \quad (2.34)$$

Jeder Resonanzzustand kann also durch eine symmetrische oder antisymmetrische Funktion dargestellt werden, welche im Unendlichen einen Kosinus oder Sinus Verlauf aufweist. Somit bezeichnet der Index “+” einen Zustand mit positiver und “-” einen mit negativer Parität. Die Ausdrücke (2.34) gelten auch für Streuzustände, so dass auch diese immer durch eine Wellenfunktion mit gerader oder ungerader Symmetrie repräsentiert werden können [1].

In [2] wurde $S(E)$ für einen Potentialtopf explizit hergeleitet und daraus die Streuphase $\delta(E)$ in der Nähe der Resonanz bestimmt. Demnach gilt, dass $|S(E)|^2$ in der Umgebung der Resonanz den Verlauf einer Breit-Wigner Verteilung,

$$|S(E)|^2 = \frac{\Gamma^2/4}{(E - E_R)^2 + \Gamma^2/4}, \quad (2.35)$$

wobei E_R die Resonanzenergie und Γ die Breite der Verteilung bezeichnet, aufweist. Für die Streuamplitude ergibt sich dann:

$$\delta(E) = \arctan\left(\frac{2}{\Gamma}(E - E_R)\right). \quad (2.36)$$

Das Γ variiert hierbei die Steigung im Wendepunkt des Arkustangens und $E - E_R$ die Position auf der Energieachse. Zudem gilt nach der Energie-Zeit-Unschärferelation folgender Zusammenhang zur Lebensdauer der Resonanz:

$$\tau = \frac{1}{\Gamma}. \quad (2.37)$$

Hier wird nun angenommen, dass die Streuamplitude für beliebige Potentiale in einer Dimension in Resonanznähe ähnlich verläuft. Es wird lediglich davon ausgegangen, dass auch die Position auf der δ -Achse einen freien Parameter darstellt, so dass

$$\delta(E) = \arctan\left(\frac{2}{\Gamma}(E - E_R)\right) + \delta_0. \quad (2.38)$$

2.3 Lüscher-Methode in 1D

Die Lüscher-Methode stellt eine Beziehung zwischen dem Energiespektrum eines Systems in einem endlichen Volumen und der Streuphase her. In einer Dimension wird hierfür der unendlich ausgedehnte Raum in Abschnitte der Länge L unterteilt, in denen sich das System wiederholt. Es liegen somit periodische Randbedingungen vor. Für ein quantenmechanisches System gilt demnach:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \psi(x + L) \\ V(x) &= V(x + L). \end{aligned} \quad (2.39)$$

Das Potential muss für große $|x|$ verschwinden und die Periodenlänge L muss so groß gewählt werden, dass Wechselwirkungen zwischen den replizierten Potentialen vernachlässigbar sind. Wegen den periodischen Randbedingungen wird, wie bei einem Potentialtopf der Länge L mit unendlich hohen Wänden, der Wellenvektor k und somit die Energie diskretisiert und die Lösungen müssen gerade oder ungerade sein. In der Nähe der Ränder $x = -\frac{L}{2}$ und $x = \frac{L}{2}$ entsprechen die Wellenfunktionen ψ_+ oder ψ_- aus (2.34). Die Entartung der Streuzustände wird aufgehoben, solange die Energie nicht viel höher als das Potential ist. Je nach Wellenlänge außerhalb und innerhalb des Potentials passt entweder der gerade oder der ungerade Zustand in eine Periode.

Man benötigt die Abhängigkeit der Energieniveaus von dem Volumen L . Diese kann mit den erläuterten Methoden der Gitterrechnung oder durch Lösen der Schrödingergleichung mit periodischen Randbedingungen berechnet werden. Bei Resonanzen lässt sich ein charakteristischer Verlauf der Energieniveaus im $E(L)$ -Spektrum erkennen. Man kann sich anhand von Abbildung 3 überzeugen, dass dies so sein muss.

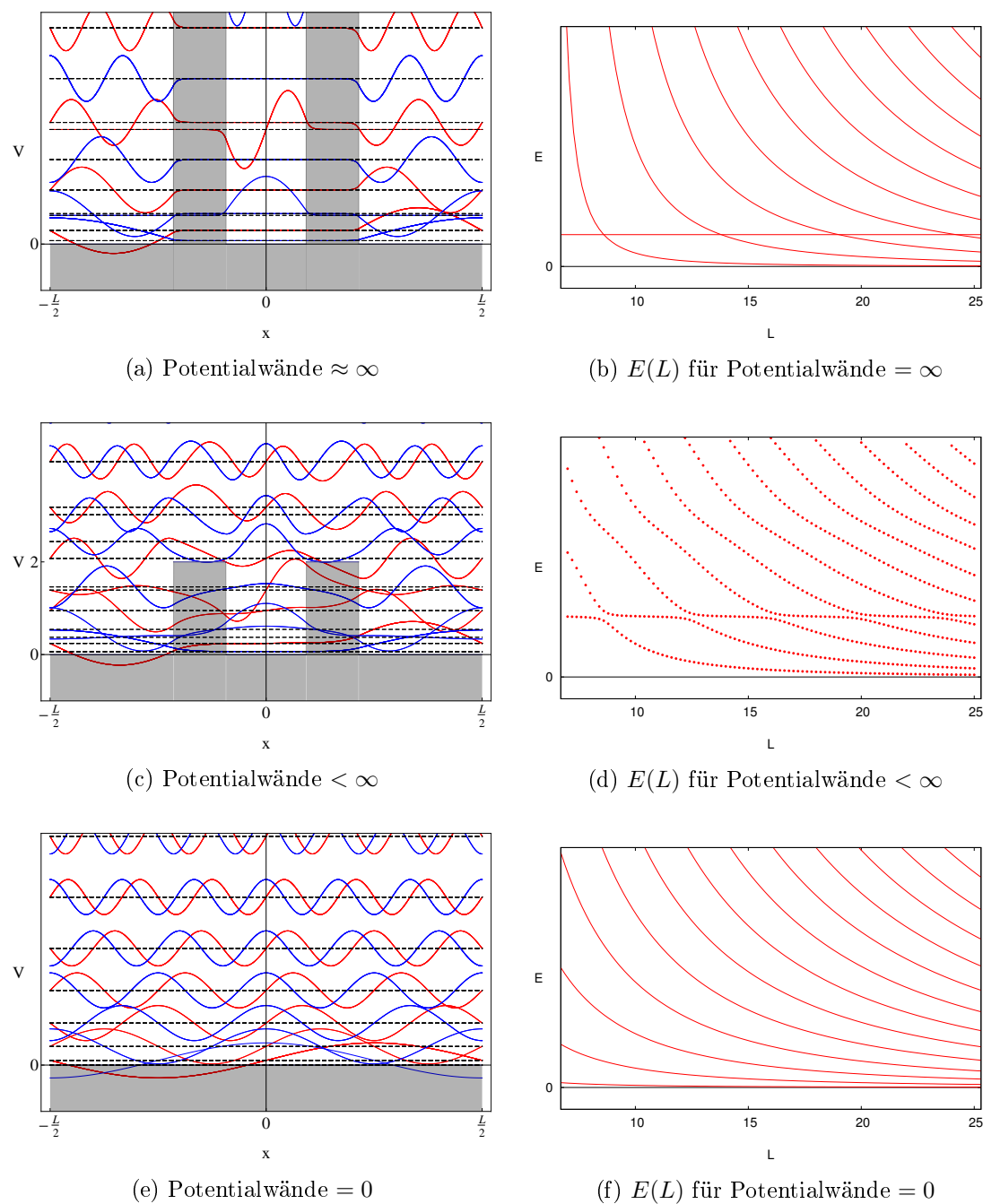


Abbildung 3: Visualisierung einer Resonanz innerhalb des $E(L)$ -Spektrums anhand eines beispielhaften Potentials mittels variierenden Wänden. (Links) Potentiale mit den Energieniveaus und Realteil der dazugehörigen Wellenfunktionen. (Rechts) Entsprechende $E(L)$ Plots für die Zustände negativer Parität (rot). (a), (c), (d) und (e) wurden numerisch durch Lösen der Schrödinger-Gleichung berechnet (siehe Abschnitt 3.1). (b) und (f) konnten analytisch ermittelt werden.

Betrachtet man ein Potential mit unendlich hohen Wänden wie in Abbildung 3 (a) zu sehen ist, so sind die Energieniveaus des inneren Topfes

$$E_n = \frac{\pi^2 n^2}{2md^2}, \quad (2.40)$$

wobei d die Länge des Topfes ist, unabhängig von L . Die linke und rechte Seite ausserhalb des Topfes bilden wegen den periodischen Randbedingungen ebenfalls einen Potentialtopf, dessen Breite sich aber mit L ändert. Da der Tunneleffekt bei unendlich hohen Potentialen nicht auftritt, kann das Teilchen, falls es sich im inneren Topf befindet, diesen nicht verlassen. In diesem Fall gibt es keine Resonanzzustände. Im $E(L)$ -Spektrum kommen Konstanten bei den Energien des inneren und Hyperbeln für die des äußeren Topfes vor, wie in Abbildung 3 (b) für die Zustände mit negativer Parität zu sehen ist. Für den wechselwirkungsfreien Fall (Abb. 3 (e)) bilden die Energieniveaus nur noch Hyperbeln (Abb. 3 (f)), da periodische Randbedingungen zu denselben Energieeigenwerten führen wie ein Potentialtopf mit der Periode als Breite und somit (2.40) gilt. Hier existieren weder gebundene Zustände, noch Resonanzen.

Vom Fall mit unendlich hohen Wänden zum ww-freien Fall gelangt man, indem man die Wände aus dem Unendlichen auf Null senkt. Das bedeutet, dass man auch $E(L)$ des freien Falls durch Senken der Wände aus dem des unendlich hohen Potential erhält. Lässt man die Wände auf einen endlichen Wert wie in Abbildung 3 (c) sinken, so existieren Resonanzen, da der Tunneleffekt nicht unterdrückt ist. Diese äußern sich im $E(L)$ -Spektrum durch eine "Folge von sich vermeidenden Niveaureisungen" [1] (Abb. 3 (d)).

Um einen Zusammenhang zur Streuphase herzustellen, betrachtet man die Lösungen für Streuzustände mit definierter Parität (2.34) an den Rändern $x = -L/2$ und $x = +L/2$. Man kann sich leicht überlegen, dass $\psi_+(x)$ die periodischen Randbedingungen nur dann erfüllen kann, wenn deren Ableitung an den Rändern verschwindet:

$$\psi'_+ \left(-\frac{L}{2} \right) = \psi'_+ \left(+\frac{L}{2} \right) = 0. \quad (2.41)$$

Analoge Überlegungen führen darauf, dass $\psi_-(x)$ an den Rändern ebenfalls verschwinden muss:

$$\psi_- \left(-\frac{L}{2} \right) = \psi_- \left(+\frac{L}{2} \right) = 0. \quad (2.42)$$

In beiden Fällen führen diese Bedingungen zum gesuchten Zusammenhang zwischen der Streuphase und dem Energiespektrum im periodischen Raum [3, S.170]:

$$\delta(E) = \pi n - \sqrt{2mE} \frac{L}{2} \quad (2.43)$$

mit $n \in \mathbb{Z}$.

Hiermit kann nun gezeigt werden, dass sich die Resonanzenergie E_R , welche man aus der Streuphase mit (2.38) ermitteln kann, zwischen dem unendlich ausgedehnten und dem periodischen Raum nicht ändert.

Es ist offensichtlich, dass bei Vergrößerung der Periodenlänge um die Wellenlänge $\lambda = \frac{2\pi}{k}$, die bestehende Wellenfunktion lediglich eine Schwingung mehr vollführt und somit die Energie des Systems sich nicht ändert:

$$L \rightarrow L + \lambda \quad \Rightarrow \quad E(L) = E(L + \lambda), \quad (2.44)$$

was sich auch im $E(L)$ -Spektrum erkennen lässt. Für die Streuphase gilt dann:

$$\begin{aligned} \delta(E + \lambda) &= \pi\tilde{n} - \sqrt{2mE(L + \lambda)} \frac{L + \lambda}{2} \\ &\stackrel{(2.44)}{=} \pi\tilde{n} - \sqrt{2mE(L)} \frac{L}{2} - \sqrt{2mE(L)} \frac{\lambda}{2} \\ &= \pi\tilde{n} - \sqrt{2mE(L)} \frac{L}{2} - k \frac{\lambda}{2} \\ &= \pi(\tilde{n} - 1) - \sqrt{2mE(L)} \frac{L}{2} \end{aligned}$$

Das n ist ein freier, ganzzahliger Parameter, den man meist so wählt, dass die Phase in einem bestimmten Intervall verläuft. Hier kann $n = \tilde{n} - 1$ gewählt werden, so dass

$$\delta(E + \lambda) = \delta(E). \quad (2.45)$$

Die Periode kann immer wieder um eine Wellenlänge verlängert werden, bis man den unendlich ausgedehnten Raum erhält. Dies ändert aber die Streuphase und somit auch die Resonanzenergie nicht.

3 Numerische Methoden

3.1 Shooting-Methode mit Mathematica

Das zu lösende quantenmechanische Problem ist die stationäre Schrödingergleichung mit dem Potential (2.23) und periodischen Randbedingungen, deren Größen, wie das Potential, einheitenlos sind:

$$-\frac{1}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (x^4 - 3)e^{-\frac{x^2}{2}} \psi(x) = E\psi(x). \quad (3.1)$$

Dies ist eine lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung mit nicht konstanten Koeffizienten und zudem eine Eigenwertgleichung, da die Energie E einen offenen Parameter darstellt. Dieses Problem kann numerisch mit der Shooting-Methode, welche in [7] erläutert wird, gelöst werden. Im vorliegenden Fall wurde das Verfahren mit dem Programmpaket "Mathematica" realisiert.

Die Masse ist im Folgenden nicht relevant und wird $m = 1$ gesetzt. Zudem müssen für die weitere Auswertung ein Energieintervall und eine Energieschrittweite definiert werden, welche an das Potential angepasst sind:

$$E_{min} = -3, \quad E_{max} = 5, \quad \Delta E = 0.2. \quad (3.2)$$

Da es sich bei dem Potential um ein achsensymmetrisches handelt und periodische Randbedingungen vorliegen, existieren nur Lösungen mit positiver oder negativer Parität. Für die Wellenfunktionen mit positiver Parität gilt:

$$\psi_+(0) = \alpha \quad \wedge \quad \left. \frac{d\psi_+(x)}{dx} \right|_{x=0} = 0. \quad (3.3)$$

Für die mit negativer Parität gilt entsprechend:

$$\psi_-(0) = 0 \quad \wedge \quad \left. \frac{d\psi_-(x)}{dx} \right|_{x=0} = \alpha. \quad (3.4)$$

Der Parameter α muss ungleich Null sein, ist ansonsten aber frei wählbar, da die Wellenfunktionen noch normiert werden müssen und kann auf $\alpha = 1$ gesetzt werden.

In Mathematica existiert die Funktion

`ParametricNDSolve[equations, y, {x, x_min, x_max}, parameter];`

welche Systeme von Differentialgleichungen für y mit freien Parametern und der Variable x im Intervall x_{min} bis x_{max} numerisch lösen kann. Das Ergebnis ist eine Funktion von x und den Parametern. Angewendet ergibt sich für den Fall positiver und negativer Parität

$$\psi_{\pm}(x, E), \quad (3.5)$$

was in Abbildung 4 dargestellt ist.

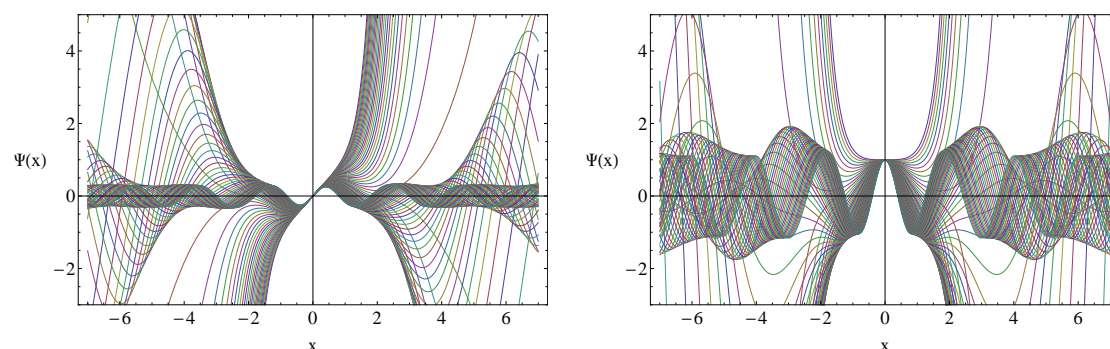


Abbildung 4: Ungerade (links) und gerade (rechts) Lösungen (3.5) mit Energien zwischen E_{min} und E_{max} in Schritten von 0.1.

Die Diskretisierung der Energie erfolgt nun über die Beachtung der Randbedingungen. Durch die Verwendung eines periodischen Raumes mit der Periode L , welche für alle hier verwendeten Abbildungen auf $L = 14$ gesetzt wurde, ergeben sich aus denselben Überlegungen wie für (2.41) und (2.42) in Abschnitt 2.3 folgende Bedingungen an die Wellenfunktionen:

$$\frac{\partial \psi_+(x, E)}{\partial x} \Big|_{x=-\frac{L}{2}} = \frac{\partial \psi_+(x, E)}{\partial x} \Big|_{x=\frac{L}{2}} = 0 \quad (3.6)$$

$$\psi_-\left(-\frac{L}{2}, E\right) = \psi_-\left(\frac{L}{2}, E\right) = 0. \quad (3.7)$$

Dies entspricht Nullstellenberechnungen, deren Lösungen den Energieeigenwerten entsprechen (Abb. 5). Als Startwerte für eine Nullstellensuche wird das Energieintervall von E_{min} bis E_{max} in Schritten von ΔE durchlaufen. Entsprechend liefert diese Implementierung viele Werte für eine Nullstelle, die sich nur in der numerischen Ungenauigkeit unterscheiden.

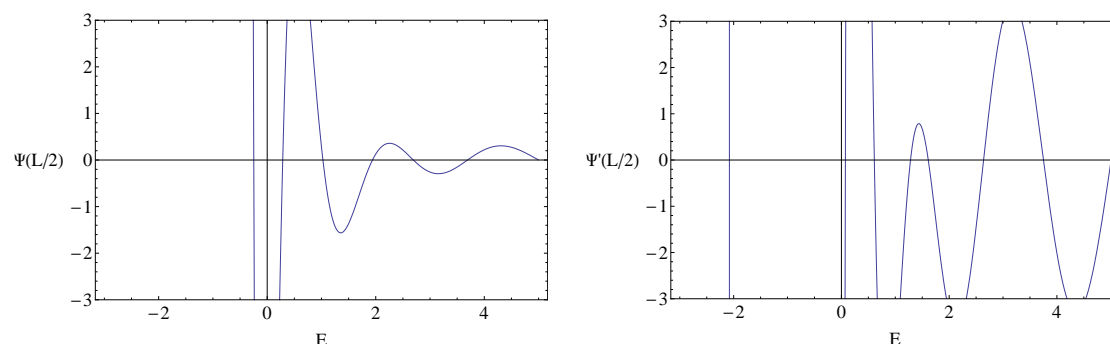


Abbildung 5: (Links) Ungerade Lösung an der Stelle $x = \frac{L}{2}$ als Funktion der Energie. (Rechts) Ableitung der geraden Lösung an derselben Stelle. Die Nullstellen entsprechen den Energieeigenwerten.

Mit den gefundenen Energieeigenwerten können nun die Lösungen $\psi_{\pm}(x)$ aus (3.5) herausgefiltert werden, welche die periodischen Randbedingungen erfüllen. Diese können folgenderweise normiert werden:

$$\hat{\psi}_{\pm}(x) = \left(\int_{-L/2}^{+L/2} |\psi_{\pm}(x)|^2 dx \right)^{-\frac{1}{2}} \psi_{\pm}(x), \quad (3.8)$$

wobei $\hat{\psi}$ die normierten Wellenfunktionen bezeichnet.

Anschließend erhält man ein Ergebnis wie es in Abbildung 6 zu sehen ist. Das hier beschriebene Mathematica-Programm ist allgemein gehalten und kann zum Lösen beliebiger symmetrischer Potentiale mit periodischen Randbedingungen verwendet werden. Die Plots in Abbildung 3 wurden ebenfalls damit erstellt.

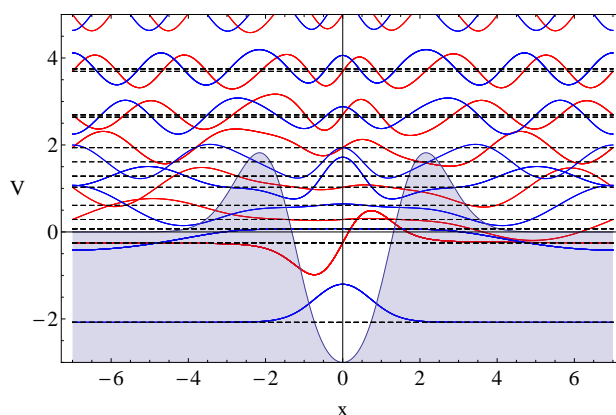


Abbildung 6: Potential (2.23) mit Energieniveaus und normierten Wellenfunktionen. Die blauen (roten) Wellenfunktionen entsprechen den Zuständen mit positiver (negativer) Parität. Bei Streuzuständen sind nur die Realteile der Wellenfunktionen aufgetragen.

Um das Energiespektrum $E(L)$ zu erhalten, müssen die Energieeigenwerte der Schrödingergleichung (3.1) mit den Bedingungen (3.6) und (3.7) für jedes L berechnet werden.

3.2 Histogramm-Methode

Eine Möglichkeit die Resonanzenergien aus dem $E(L)$ -Spektrum zu bestimmen liefert die Histogramm-Methode [1]. Man betrachtet hierbei einen Energiebereich, in dem eine Resonanz liegt und diskretisiert sowohl die Energie- als auch die L -Achse. Durch Zählen der $E(L)$ -Werte für jedes Energieintervall erhält man eine Häufigkeitsverteilung, deren Maximum bei E_R liegt. Je feiner man die Achsen diskretisiert, desto genauer kann die Resonanzenergie bestimmt werden. Die Ermittlung dieser kann zudem noch verbessert werden, indem man von der Häufigkeitsverteilung die des ww-Falls subtrahiert. Als ww-freier Fall wird hier die Situation wie in Abbildung 3 (f) mit dem Potential $V = 0$ verstanden.

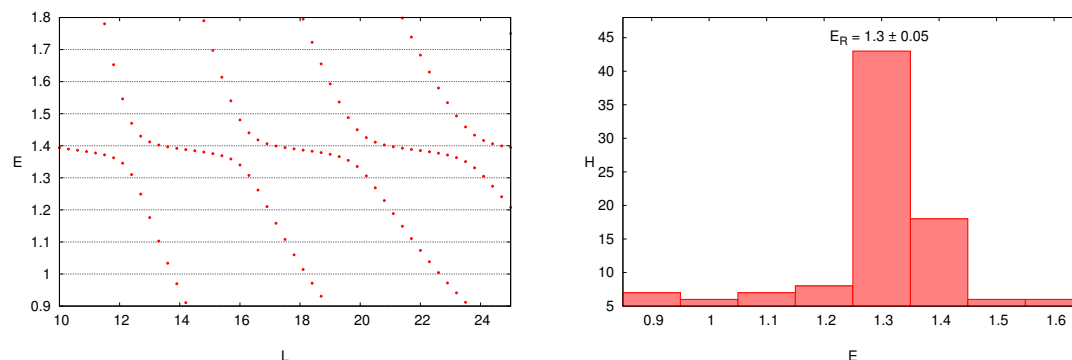


Abbildung 7: Demonstration der Histogramm-Methode an der niedrigsten Resonanz mit negativer Parität aus Abbildung 3 (d). (Links) Ausschnitt aus dem $E(L)$ -Spektrum, in dem die Resonanz liegt mit $0.9 \leq E \leq 1.8$ und $10 \leq L \leq 25$. Die Energieachse wurde in Intervalle der Breite 0.1 unterteilt und die L -Achse in Schritten von 0.3 diskretisiert. (Rechts) Häufigkeitsverteilung $H(E)$ der $E(L)$ -Werte auf die Energieintervalle ohne Subtraktion des wwf-freien Falls.

Zudem hat sich herausgestellt, dass die Breite Γ der Resonanz mit der Halbwertsbreite der Häufigkeitsverteilung abgeschätzt werden kann, falls die Diskretisierung fein genug gewählt wird.

3.3 Gitterrechnungen

Eine weitere Möglichkeit das Spektrum $E(L)$ für ein quantenmechanisches System zu erhalten, bietet die numerische Berechnung von Korrelationsfunktionen auf dem Gitter. Hierfür diskretisiert man die Raumzeit mit dem Gitterabstand a und periodisiert die unendlich ausgedehnte Zeitachse mit der Länge $T \cdot a$, wobei T die Anzahl an Gitterpunkten in einer Periode angibt. Der Raum muss ebenfalls periodisch gewählt werden, da dies für die Lüscher-Methode (Abschnitt 2.3) benötigt wird. Es gilt also:

$$\begin{aligned} x(t + Ta) &= x(t) \\ O(x + L) &= O(x). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Man kann alle Größen dimensionslos darstellen, indem man sie in Einheiten von a ausdrückt. Diese werden hier wie folgt gekennzeichnet:

$$\tilde{x} = \frac{x}{a}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{a}, \quad \tilde{m} = ma, \quad \tilde{a} = 1. \quad (3.10)$$

Wegen der Diskretisierung sieht die einheitenlose, euklidische Wirkung (2.4) nun folgendermaßen aus:

$$S_E[\tilde{x}] = \sum_{\tilde{t}} \left(\frac{\tilde{m}}{2} (\tilde{x}(\tilde{t} + 1) - \tilde{x}(\tilde{t}))^2 + \tilde{V}(\tilde{x}) \right). \quad (3.11)$$

Das Pfadintegral vereinfacht sich auf dem Gitter zu

$$Z = \int_{-\frac{\tilde{L}}{2}}^{+\frac{\tilde{L}}{2}} \dots \int_{-\frac{\tilde{L}}{2}}^{+\frac{\tilde{L}}{2}} \prod_{\tilde{t}=0}^{T-1} d\tilde{x}(\tilde{t}) e^{-S_E[\tilde{x}]}.$$
 (3.12)

Um die 2-Punkt-Funktion (2.6) auf dem Gitter auszuwerten, verwendet man Monte-Carlo Algorithmen. Da das Pfadintegral ein ‘‘Integral über alle Pfade’’ ist, ist die Idee dahinter, Pfade $\tilde{x}_i(\tilde{t})$ gemäß der Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P(\tilde{x}_i) = \frac{e^{\tilde{S}_E(\tilde{x}_i)}}{Z}$$
 (3.13)

zu erstellen und die Observablen auf diesen zu berechnen. Anschließend erhält man den Vakuumerwartungswert als Mittelwert:

$$\langle \Omega | \hat{O}(\hat{x}(\tilde{t})) \hat{O}(\hat{x}(0)) | \Omega \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N O(\tilde{x}_j(\tilde{t})) O(\tilde{x}_j(0)).$$
 (3.14)

In der Praxis ist die Menge an Pfaden N immer endlich, so dass bei der Mittelung ein statistischer Fehler σ gemacht wird, welcher mit Methoden aus der Statistik bestimmt werden kann. Für die 2-Punkt-Funktion gilt somit:

$$\tilde{c}(\tilde{t}) = \langle \Omega | \hat{O}(\hat{x}(\tilde{t})) \hat{O}(\hat{x}(0)) | \Omega \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N O(\tilde{x}_j(\tilde{t})) O(\tilde{x}_j(0)) \pm \sigma.$$
 (3.15)

Eine Verteilung gemäß (3.13) wird nach langer Laufzeit und unabhängig vom Anfangspfad erreicht, falls die Bedingung ‘‘detailed balance’’,

$$P(\tilde{x}_j(\tilde{t})) p_{j \rightarrow k} = P(\tilde{x}_k(\tilde{t})) p_{k \rightarrow j},$$
 (3.16)

erfüllt ist. Hierbei bezeichnet $p_{j \rightarrow k}$ die Übergangswahrscheinlichkeit vom Pfad \tilde{x}_j zu \tilde{x}_k . Der *Metropolis-Algorithmus* erfüllt, wie in [7, S. 85] gezeigt, diese Bedingung und wird hier für die Erstellung der Pfade verwendet.

Bei diesem Algorithmus wird ein neuer Pfad \tilde{x}_k erstellt, indem der aktuelle Pfad an einem Gitterpunkt $\tilde{x}_j(\tilde{t}_i)$ um einen Betrag $\delta \in [-\Delta\tilde{x}, \Delta\tilde{x}]$, wobei $\Delta\tilde{x} \in \mathbb{R}^+$, verrückt wird zu $\tilde{x}_k(\tilde{t}_i) = \tilde{x}_j(\tilde{t}_i) + \delta$. Der neue Pfad wird mit der Wahrscheinlichkeit

$$p_{j \rightarrow k} = \min \left(1, e^{-(\tilde{S}_E(\tilde{x}_k) - \tilde{S}_E(\tilde{x}_j))} \right)$$
 (3.17)

angenommen. Man spricht von einem ‘‘Sweep’’, falls jeder Gitterpunkt einmal geändert wurde. Es wird jeder Pfad nach einem Sweep zur Berechnung verwendet, so dass die Menge an Pfaden N der Anzahl an Sweeps entspricht. Das $\Delta\tilde{x}$ wird so gewählt, dass ungefähr die Hälfte der erzeugten Pfade während eines Sweeps akzeptiert werden.

Erfahrungsgemäß ist dann eine schnelle Bewegung durch den Raum aller Pfade gegeben [7, S.87].

Vor den Berechnungen, muss das System thermalisiert werden. Man unterscheidet zwischen einem heißen und kalten Start, bei dem die Werte des Anfangspfades an jedem Gitterpunkt zufällig aus $[-\tilde{L}/2, \tilde{L}/2]$ ausgewählt bzw. alle auf Null gesetzt werden. Das Erreichen eines Gleichgewichtszustandes erkennt man an der Wirkung in Abhängigkeit von der Anzahl an Sweeps. Wie in Abbildung 8 gezeigt, konvergiert diese und beide Startmöglichkeiten sind nach endlich vielen Sweeps qualitativ ununterscheidbar.

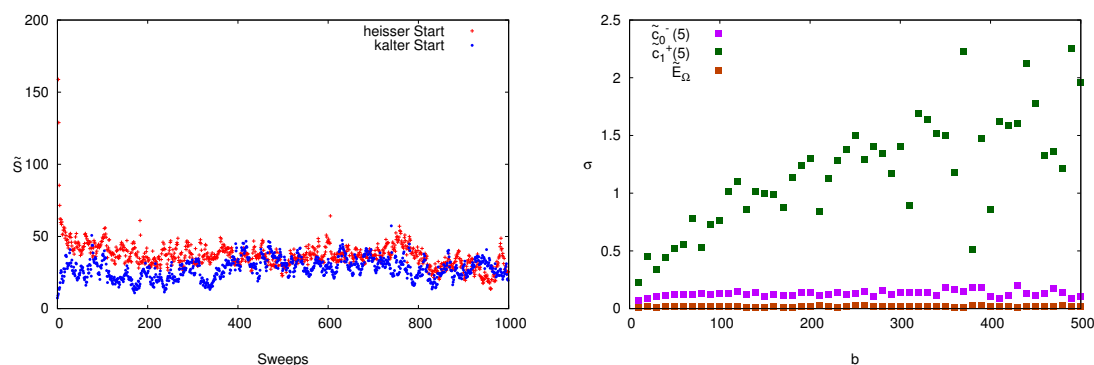


Abbildung 8: (Links) Wirkung in Abhängigkeit von der Anzahl an Sweeps mit kaltem und heißem Start. (Rechts) Fehler der beiden 2-Punkt-Funktionen (2.11) und (2.13) am Gitterpunkt $\tilde{t} = 5$ und der Grundzustandsenergie in Abhängigkeit von der Bingröße für ein System mit dem Potential (4.8).

Nach Erreichen des Gleichgewichtszustandes, wird die Menge an Pfaden erstellt, mit denen die Vakuumerwartungswerte berechnet werden können.

Um Autokorrelation zu vermeiden, kann das Binning-Verfahren angewendet werden. Hierbei wird die Menge an Pfaden in “Bins” der Größe b unterteilt und der Mittelwert zunächst für jeden Bin berechnet. Anschließend erhält man den Wert und den Fehler für den Vakuumerwartungswert aus der Mittelung dieser Mittelwerte. Die Wahl der Bingröße ist entscheidend und kann aus der Abhängigkeit der Fehler der Observablen von b abgelesen werden (Abb. 8). Diese sollten ab einem bestimmten b stagnieren, welches als Bingröße gewählt wird.

Mit den 2-Punkt-Funktionen (2.11) und (2.13) und der Grundzustandsenergie (2.14) können nun die niedrigsten drei Niveaus des Energiespektrums $\tilde{E}(\tilde{L})$ berechnet werden, indem man die Energiewerte für jedes \tilde{L} ermittelt. Um mit den Gitterrechnungen Ergebnisse, welche frei von systematischen Fehlern aufgrund der Diskretisierung sind, zu erhalten, muss der Grenzwert ins Kontinuum, $a \rightarrow 0$, und zur unendlich ausgedehnten Zeit, $Ta \rightarrow \infty$, durchgeführt werden. Dies kann man durch Extrapolation für verschiedene a und Ta erreichen.

4 Auswertung und Ergebnisse

4.1 Resonanzen am Potential $V^{(1)}$

Zunächst werden die Resonanzen des Potentials (2.23) in einem Energieintervall von E_{min} bis E_{max} wie in (3.2) untersucht. Der Vergleich mit dem harmonischen Potential (Abschnitt 2.2.1) legt nahe, dass das Potential zwei gebundene und drei Resonanzzustände in diesem Intervall besitzt. Sowohl der erste gebundene, als auch der erste Resonanzzustand haben positive Parität (Abb. 2). Bei den jeweils folgenden Zuständen wechselt sich die Parität ab. Die bekannte analytische Lösung für die Energie,

$$E_{n,harm} = \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - 3, \quad (4.1)$$

ergibt mit $\omega = \sqrt{3}$ (2.26) folgende Energiewerte:

n	$E_{n,harm}$
0	-2.134
1	-0.402
2	1.3301
3	3.0622
4	4.7942

(4.2)

In Abschnitt 3.1 wurde erläutert, wie das Problem numerisch mithilfe der Shooting-Methode gelöst werden kann. Die Energieeigenwerte werden mit $L = 14$ berechnet. Die Werte für die gebundenen Zustände des periodischen Systems entsprechen denen im unendlich ausgedehnten Raum, weil sie L -unabhängig sind. Mathematica berechnet die Werte mit einer Genauigkeit auf bis zu zwölf Nachkommastellen. Eine höhere Genauigkeit kann aufgrund numerischer Fehler bei der Nullstellensuche nicht erzielt werden. Für die Energien der gebundenen Zustände ergibt sich:

$$\begin{aligned} E_0 &= -2.079 \\ E_1 &= -0.247. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Der niedrigere Wert entspricht dem Grundzustand und hat positive Parität. Der erste angeregte Zustand weist negative Parität auf (Abb. 6). Die Ergebnisse für die Energieeigenwerte mit $E > 0$ entsprechen denen von Streuzuständen am Potential im periodischen Fall. Im ausgedehnten Raum sind diese, wie bereits erwähnt, nicht diskretisiert. Diese Werte entsprechen also nicht den Resonanzenergien. Wie in Abschnitt 2.3 erläutert, stellt die Lüscher-Methode eine Beziehung zwischen diesen Energien und der Streuphase, aus welcher dann die Resonanzenergie bestimmt werden kann, her. Um von dieser Beziehung Gebrauch zu machen, muss $E(L)$ ermittelt werden. Hierfür werden die Energieeigenwerte mit der Shooting-Methode für $8 \leq L \leq 25$ und einer Schrittweite von $\Delta L = 0.1$ berechnet. Abbildung 9 zeigt die Ergebnisse, wobei der Fall positiver und negativer Parität separat betrachtet wurde.

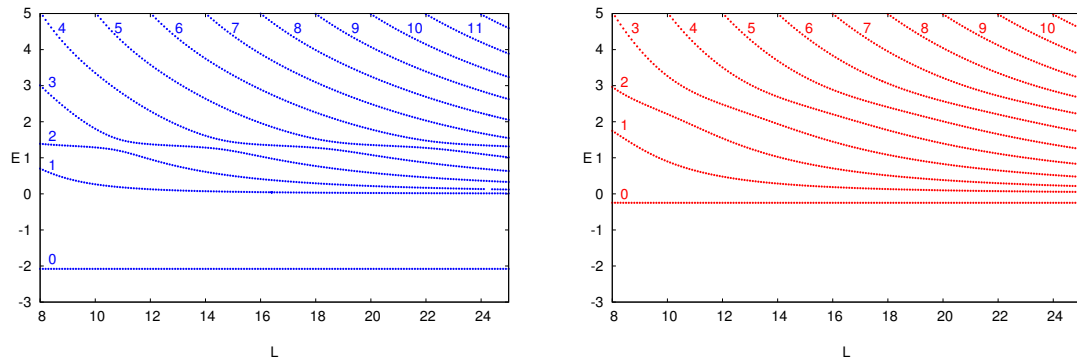


Abbildung 9: Energiespektum in Abhängigkeit von der Periodenlänge für das Potential (2.23) für den Fall positiver (links, blau) und negativer Parität (rechts, rot). Die Energieniveaus sind in der jeweiligen Farbe durchgezählt. Im Fall der positiven Parität erkennt man, dass bei $L \approx 24$ Werte für das Niveau 2 fehlen. Hier war $\Delta E = 0.2$ (3.2) für die Startwerte der Nullstellensuche offenbar zu groß und die Nullstellen wurden übersprungen.

Die Resonanz ist im Fall mit positiver Parität bei $E \approx 1.5$ eindeutig zu erkennen. Für den Fall mit negativer Parität ist dies wesentlich schwieriger. Es existiert aber eine Resonanz zwischen $E = 2$ und $E = 3$, welche im $E(L)$ -Spektrum nur leicht angedeutet wird. Die gebundenen Zustände erkennt man als Konstanten bei $E < 0$.

Nun kann die Beziehung (2.43) verwendet werden, um die Streuphase im Intervall $[-\pi, +\pi]$ in Abhängigkeit von der Energie zu bestimmen. Zunächst aber wird $n = 0$ gesetzt und $\delta(E)$ für alle Niveaus mit $E > 0$ berechnet.

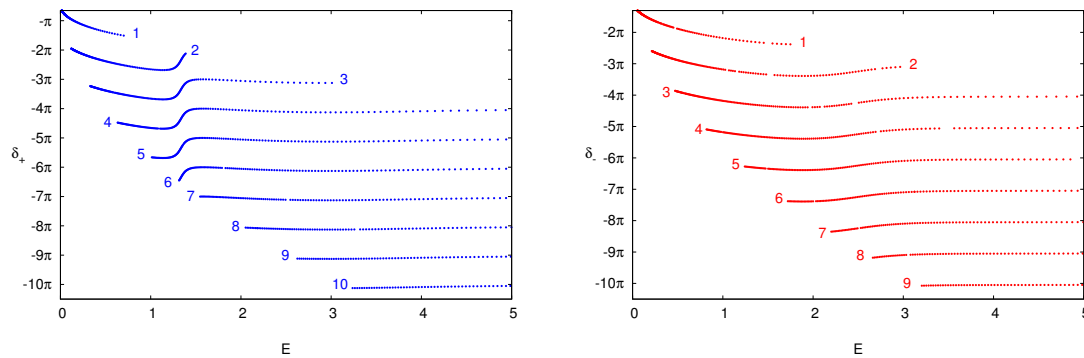


Abbildung 10: Streuphase in Abhängigkeit von der Energie nach (2.43) mit $n = 0$ für alle Energieniveaus mit positiver und negativer Parität. Die Niveaus sind wie in Abbildung 9 durchnummeriert.

Die Streuphase macht bei der Resonanzenergie, wie nach (2.38) erwartet, einen Sprung (Abb. 10). Wie auch bei den Energiespektren in Abbildung 9 ist die Resonanz im Fall positiver Parität ausgeprägter und der Phasensprung ist deutlicher zu erkennen.

Im Gegensatz dazu ist der Sprung im Fall negativer Parität kleiner und weniger abrupt. Man sieht, dass die Niveaus alle denselben Verlauf aufweisen und sich um π unterscheiden. Sie decken lediglich, je nachdem welches Energieniveau man betrachtet und welche Grenzen L_{min} und L_{max} verwendet wurden, unterschiedliche Energiebereiche in $\delta(E)$ ab. Der Phasensprung kann bei jedem Energieniveau, welches

$$E(L) > E_R \text{ für kleine } L \text{ und } E(L) < E_R \text{ für große } L \quad (4.4)$$

erfüllt, mit passend gewählten L -Grenzen beobachtet werden.

Man wählt nun für jedes Energieniveau das n in (2.43) so, dass die dazugehörige Phase im Intervall $[-\pi, +\pi]$ liegt. Plottet man alle Niveaus zusammen, so fallen diese übereinander und man erhält die Funktion $\delta(E)$. Anschließend kann die Funktion (2.38) an das $\delta(E)$ gefittet werden, um Werte für die Resonanzenergie E_R und die Breite Γ der Resonanz zu erhalten.

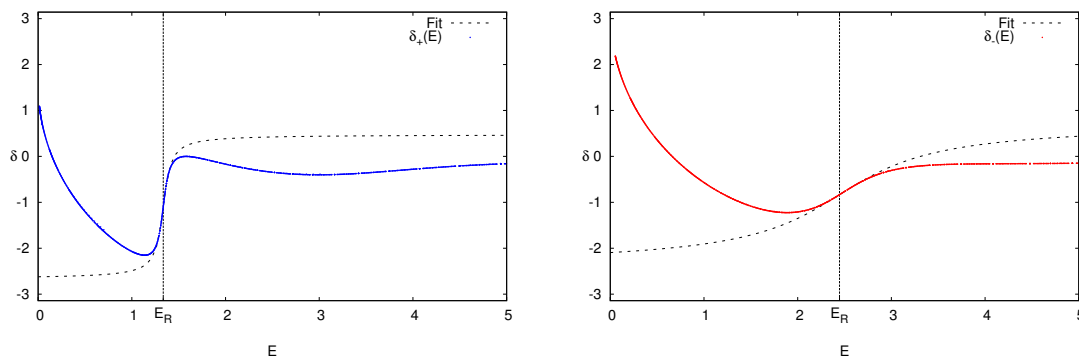


Abbildung 11: Streuphase mit Fit nach (2.38) für den Fall positiver und negativer Parität. Die Resonanzenergien sind als vertikale, gestrichelte Linien markiert.

Die Auswertung liefert eine schmale Resonanz im Fall positiver Parität und eine breite Resonanz mit negativer Parität, wie an den folgenden Ergebnissen erkennbar ist:

P	E_R	Γ
+	1.33538	0.12046
-	2.44622	1.56924

(4.5)

Nach (2.37) ist die Lebensdauer einer Resonanz größer, je schmaler deren Breite Γ ist. Interpretiert man die Masse $m = 1$ als die reduzierte Masse μ im Schwerpunktsystem zweier aneinander elastisch streuender Teilchen, so entspricht das hier betrachtete Problem einer Streuung eines Teilchens der Masse μ am Potential (2.23), welches die Wechselwirkung zwischen den Teilchen beschreibt. Dabei entsteht ein kurzlebiger gebundener Zustand mit der Masse $E_R^{(P=-)}$ und ein länger gebundener der Masse $E_R^{(P=+)}$.

Abschließend werden die Resonanzenergien mit der Histogramm-Methode (Abschnitt 3.2) ermittelt. Um ein eindeutigeres Ergebnis zu erhalten, wird die Häufigkeitsverteilung der $E(L)$ -Werte des ww-freien Falls subtrahiert. Abbildung 12 zeigt die resultierenden Häufigkeitsverteilungen.

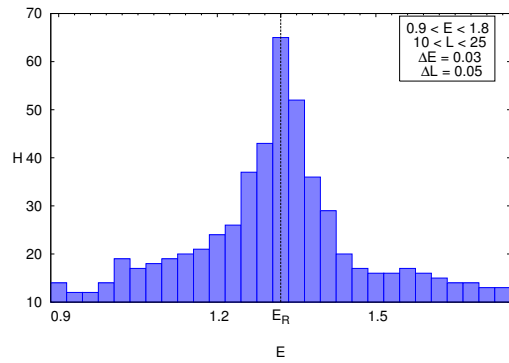
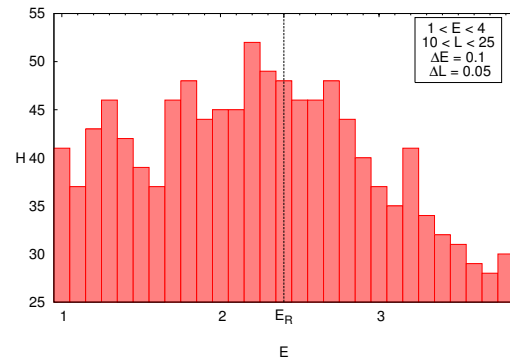
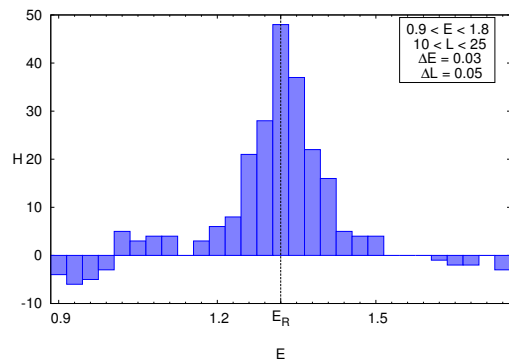
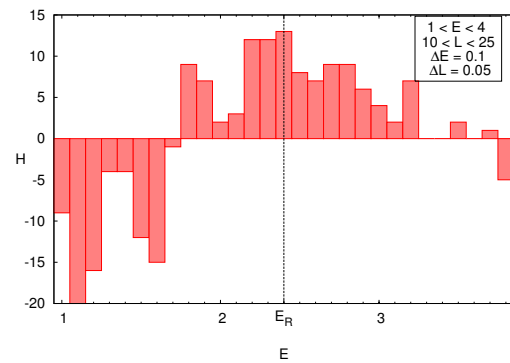
(a) $H(E)$ für $P = +$ (b) $H(E)$ für $P = -$ (c) $H(E) - H_{frei}(E)$ für $P = +$ (d) $H(E) - H_{frei}(E)$ für $P = -$

Abbildung 12: Häufigkeitsverteilungen nach Anwendung der Histogramm-Methode auf $E(L)$ aus Abbildung 9. Die oberen beiden Bilder zeigen die Verteilung ohne Subtraktion der des ww-freien Falls. Bei den unteren wurde diese abgezogen.

Die Resonanz mit positiver Parität ist auch mit der Histogramm-Methode deutlich besser zu bestimmen. In den Häufigkeitsverteilungen ist diese auch als schmale Resonanz erkennbar (Abb. 12 (a) und (c)). Hingegen reicht im Fall der negativen Parität die Häufigkeitsverteilung der $E(L)$ -Werte nicht aus um die Resonanzenergie zu bestimmen. Das Maximum der Verteilung liegt nicht bei E_R (Abb. 12 (b)), welches man aus der Verteilung mit Subtraktion der des ww-freien Falls erhält (Abb. 12 (d)). Diese Resonanz ist auch breiter als die mit positiver Parität. Aus den Häufigkeitsverteilungen können folgende Werte für die Resonanzenergien abgelesen werden:

$$\begin{aligned} E_{R,H}^{(P=+)} &= 1.31 \\ E_{R,H}^{(P=-)} &= 2.4 \end{aligned} \quad (4.6)$$

Desweiteren können die Resonanzbreiten aus den Halbwertsbreiten der Häufigkeitsverteilungen (Abb. 12 (c) und (d)) auf folgende Werte abgeschätzt werden:

$$\begin{aligned}\Gamma_H^{(P=+)} &\approx 0.12 \\ \Gamma_H^{(P=-)} &\approx 1.5\end{aligned}\tag{4.7}$$

Nun können die Ergebnisse aus der harmonischen Näherung (4.2), der Shooting-Methode (4.3), der daraus ermittelten Streuphase (4.5) und der Histogramm-Methode ((4.6) und (4.7)) verglichen werden.

Die Berechnung der Energien der gebundenen Zustände mit der Shooting-Methode, der Resonanzenergien und deren Breiten aus der Streuphase liefert Ergebnisse, welche nur geringfügig von den Werten in [1] abweichen.

Wie zu erwarten war, ermöglicht die harmonische Näherung nur eine grobe Abschätzung für kleine Energien. Die Werte für die beiden gebundenen Zustände und den ersten Resonanzzustand haben die richtige Größenordnung und sind als Näherung akzeptabel. Die höheren Resonanzen können jedoch hiermit nicht abgeschätzt werden, da das Potential für $E > 2$ stark vom harmonischen abweicht (Abb. 2). Auch die Anzahl an Resonanzen ist deswegen nicht korrekt. Zudem lässt sich keine Aussage über die Breite Γ machen.

Hingegen liefert die Histogramm-Methode Werte für die Resonanzenergien, welche im Rahmen der Diskretisierung mit denen aus der Streuphase übereinstimmen. Auch die Halbwertsbreite eignet sich als grobe Abschätzung für die Resonanzbreiten. Eine feinere Diskretisierung würde eine bessere Genauigkeit erbringen, wodurch diese konzeptionell sehr einfache Methode gute Resultate liefert.

Eine Bestimmung des $E(L)$ -Spektrums mit den Methoden aus der Gitter-QCD, welche in Abschnitt 2.1.1 und 2.1.2 besprochen wurden, erweist sich an dem hier betrachteten Potential (2.23) als unbrauchbar, da es zwei gebundene Zustände besitzt. Man kann mit den Methoden die Energiewerte für den Grundzustand und den ersten und zweiten angeregten Zustand bestimmen. Da aber, wie oben beschrieben, nur Energieniveaus mit (4.4) zu einem Phasensprung in der Streuphase führen, würde die Berechnung der ersten drei Niveaus nicht ausreichen.

Um dennoch einen Vergleich zwischen Gitterrechnungen und der hier besprochenen quantenmechanischen Betrachtung zu erstellen, wird im Folgenden das Potential

$$V^{(2)}(x) = \begin{cases} V^{(1)}(x) & \text{für } |x| > \sqrt[4]{3} \\ 0 & \text{für } |x| \leq \sqrt[4]{3} \end{cases}\tag{4.8}$$

untersucht, welches keine gebundenen Zustände mehr besitzt. Es sieht für $E \geq 0$ aus wie (2.23) in Abbildung 1. Der Abschnitt, indem $V^{(1)} < 0$ ist, wird auf Null gesetzt. Zudem ist, wie in Abschnitt 4.2 gezeigt, die erste Resonanzenergie niedrig genug, um einen Phasensprung in der Streuphase des niedrigsten angeregten Zustandes positiver Parität zu beobachten.

4.2 Resonanzen am Potential $V^{(2)}$

Die Energiespektren werden mit der Shooting-Methode genauso ermittelt wie bei $V^{(1)}$ in Abschnitt 4.1. Im Folgenden sollen die Ergebnisse aus den Gitterrechnungen (Abschnitt 3.3) hervorgehoben werden.

Die 2-Punkt-Funktionen werden mit dem Mittelwert (3.15) berechnet. Die hierfür benötigten Pfade erstellt man mit dem Metropolis-Algorithmus, welcher in Abschnitt 3.3 erläutert wurde. Zunächst müssen die Parameter für die Gitterrechnungen festgelegt werden. Ein Richtwert für die Anzahl an Gitterpunkten ist bei 2-Punkt-Funktionen die Inverse zu ermittelnde Energiedifferenz. Um gute Ergebnisse zu erhalten, sollte folgende Bedingung erfüllt sein:

$$\tilde{a} = 1 \ll \frac{1}{\tilde{E}_1 - \tilde{E}_\Omega} \ll T. \quad (4.9)$$

Die Energiedifferenzen sind aus der Berechnung mit der Shooting-Methode bereits bekannt und das T kann passend gewählt werden. Für das hier betrachtete Intervall $8 \leq \tilde{L} \leq 24$ ist diese Bedingung mit $T = 64$ immer erfüllt. Die Anzahl an verwendeten Pfaden wird auf $N = 100000$ gesetzt und es werden vor jedem Durchlauf $N_{therm} = 1000$ Thermalisierungssweeps durchgeführt, die, wie in Abbildung 8 zu sehen, ausreichen, um das System ins Gleichgewicht zu bringen. Aus der Betrachtung von $\sigma(b)$ in Abbildung 8 folgert man, dass für die 2-Punkt-Funktion \tilde{c}_0^- und die Grundzustandsenergie \tilde{E}_Ω die Binggröße auf $b = 100$ gesetzt werden kann, um Autokorrelationen bei diesen Observablen zu vermeiden. Hingegen stagniert der Fehler von \tilde{c}_1^+ nicht bis zu einer Binggröße von $b = 1000$. Diese Größe weist also starke Autokorrelationen auf. Hier wird die Binggröße auf $b = 100$ gesetzt und eventuelle systematische Fehler für das erste angeregte Niveau positiver Parität in Kauf genommen. Als statistischer Fehler wird der Standardfehler verwendet.

Wählt man den Operator wie in (2.15), so kann die Grundzustandsenergie des Systems berechnet werden. Die dimensionslose Größe hierzu, mit der der Mittelwert gebildet wird, sieht folgendermaßen aus:

$$\tilde{\mathcal{O}}(\tilde{x}(\tilde{t})) = \frac{1}{2} - \frac{\tilde{m}}{2}(\tilde{x}(\tilde{a}) - \tilde{x}(0))^2 + \tilde{V}(\tilde{x}(\tilde{t})), \quad (4.10)$$

wobei $\tilde{V}(\tilde{x}) = V^{(2)}(x)$ und $\tilde{m} = 1$ gesetzt werden. Anschließend wird mittels χ^2 -Fit an eine Konstante die Grundzustandsenergie aus den Mittelwerten und dazugehörigen Fehlern an jedem Gitterpunkt ermittelt (Abb. 13).

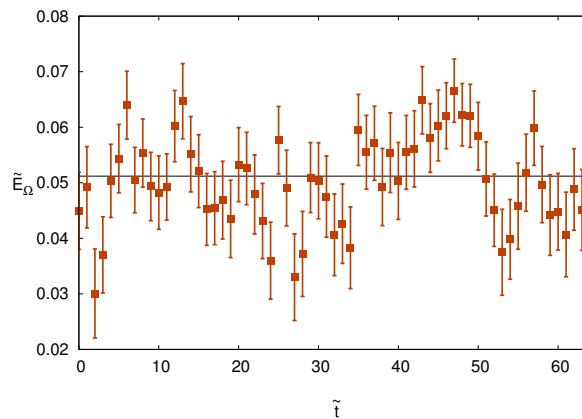


Abbildung 13: Ermittlung der Grundzustandsenergie aus den Mittelwerten und Fehlern pro Gitterpunkt für $\tilde{L} = 14$ und $\Delta\tilde{x} = 6$. $\langle \tilde{E}_\Omega \rangle$ entspricht der Geraden.

Mit dem Operator (2.10) kann die Energiedifferenz zwischen dem niedrigsten Zustand negativer Parität und dem Grundzustand berechnet werden. Die 2-Punkt-Funktion hängt von den Orten zweier Gitterpunkte ab. Da wegen der zeitlichen Periodizität kein Gitterpunkt ausgezeichnet ist, ergeben sich T Werte pro Pfad, die zum Mittelwert an jedem Gitterpunkt beitragen. Der Wert für die Energiedifferenz kann dann durch einen Fit mit (2.11) für $\tilde{t} \gg 0$ bestimmt werden. Üblich ist es jedoch, aus $\tilde{c}_0^-(\tilde{t})$ die effektive Masse \tilde{m}_{eff} zu bilden und ebenfalls einen χ^2 -Fit an eine Konstante durchzuführen. Die effektive Masse entspricht der gesuchten Energiedifferenz:

$$\tilde{m}_{\text{eff}} = \tilde{E}_0^- - \tilde{E}_\Omega \approx \ln \left(\frac{\tilde{c}_0^-(\tilde{t})}{\tilde{c}_0^-(\tilde{t}+1)} \right) \quad \text{für } \tilde{t} \rightarrow \infty \quad (4.11)$$

Man führt den Fit für einen Bereich in dem die effektive Masse ein konstantes Plateau aufweist, wie in Abbildung 14 gezeigt, durch.

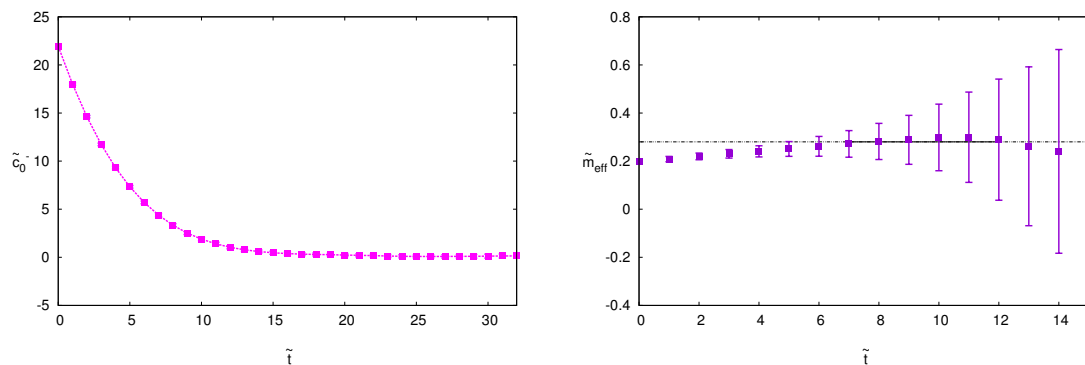


Abbildung 14: (Links) 2-Punkt-Funktion für $\tilde{L} = 14$. (Rechts) Dazugehörige effektive Masse mit χ^2 -Fit im Intervall $7 \leq \tilde{t} \leq 12$.

Da wegen den periodischen Randbedingungen die 2-Punkt-Funktion symmetrisch um $\tilde{t} = \frac{T}{2}$ ist und somit in der zweiten Hälfte wieder ansteigt, betrachtet man nur das halbe Intervall.

Abschließend kann der Operator (2.12) verwendet werden, um die Energiedifferenz zwischen dem niedrigsten angeregten Zustand positiver Parität und dem Grundzustand zu erhalten. Die 2-Punkt-Funktion hierfür ist ebenfalls eine abfallende Exponentialfunktion und verläuft ähnlich wie in Abbildung 14. Eine effektive Masse kann aber ohne explizite Berechnung der additiven Konstante in (2.13) nicht bestimmt werden. Um den Wert zu erhalten, wird der χ^2 -Fit nun mit der Funktion (2.13) für $\tilde{t} \gg 0$ erstellt.

Die Rechnungen werden für das \tilde{L} -Intervall mit einer Schrittweite von $\Delta\tilde{L} = 0.5$ durchgeführt und das $\Delta\tilde{x}$ jedes Mal angepasst. Mit den jeweils ermittelten Differenzen $\tilde{E}_0^- - \tilde{E}_\Omega$ und $\tilde{E}_1^+ - \tilde{E}_\Omega$ und dem Wert für die Grundzustandsenergie $\langle \tilde{E}_\Omega \rangle$ wird das Spektrum $\tilde{E}(\tilde{L})$ für die ersten drei Energieniveaus erstellt. Abbildung 15 stellt dieses dem $E(L)$ aus der Berechnung mit der Shooting-Methode gegenüber.

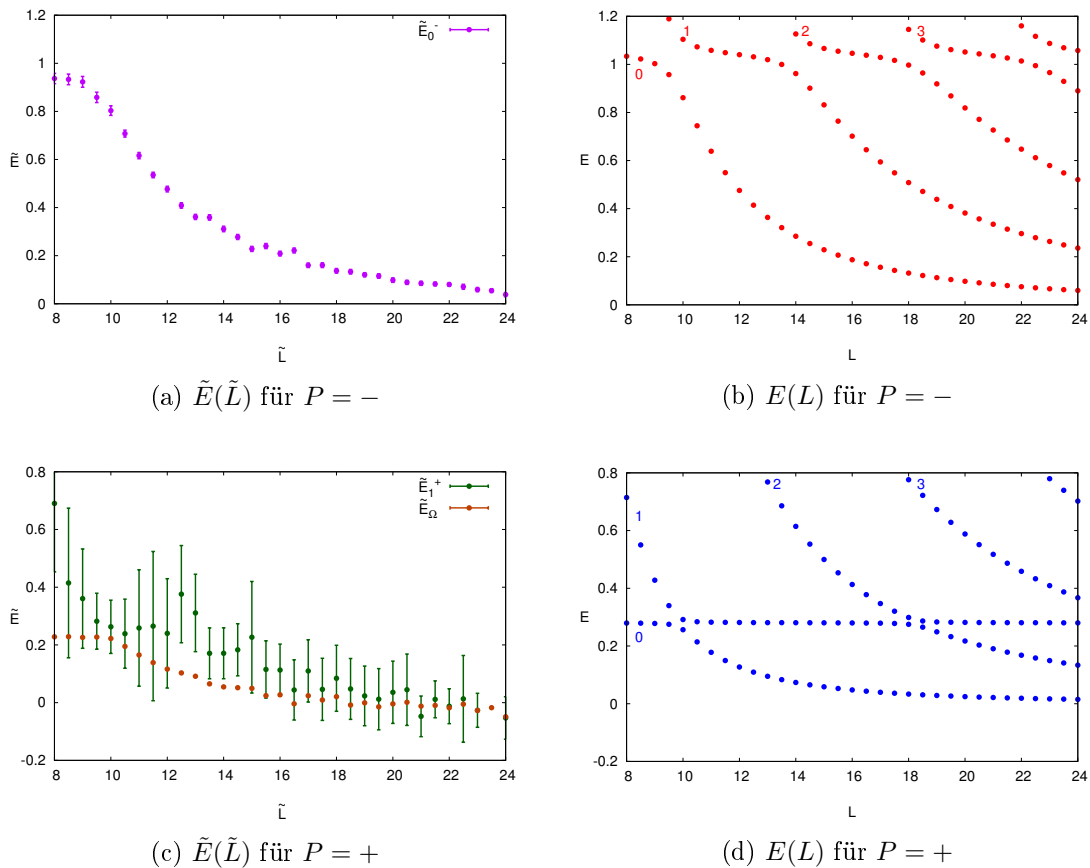


Abbildung 15: Vergleich zwischen $E(L)$, welches mit Mathematica berechnet wurde (rechts) und dem $\tilde{E}(\tilde{L})$ aus den Gitterrechnungen (links).

Sowohl die Berechnungen mit der Shooting-Methode, als auch mit den Gitterrechnungen liefern dimensionslose Ergebnisse. Die in Abschnitt 3.3 eingeführte Kennzeichnung der Größen wurde hier beibehalten, um zwischen den Resultaten unterscheiden zu können. Die Gegenüberstellung in Abbildung 15 zeigt deutliche Diskrepanzen auf. Das Ergebnis $\tilde{E}_0^-(\tilde{L})$ aus der Gitterrechnung in Abbildung 15 (a) ist mit dem Niveau 0 in (b) zu vergleichen. Man erkennt, dass die Werte auch im Rahmen statistischer Fehler nur grob übereinstimmen. Ein systematischer Fehler ist der in Abschnitt 3.3 erwähnte, für gute Ergebnisse notwendige Grenzwert ins Kontinuum, welcher hier nicht durchgeführt wurde. Desweiteren sind die Ergebnisse für jedes \tilde{L} stark von den Parametern T und $\Delta\tilde{x}$ abhängig, welche nur geringfügig an das jeweilige \tilde{L} angepasst wurden. Auch der Fitbereich für die effektive Masse wurde für alle \tilde{L} beibehalten, wodurch Abweichungen entstehen. Dennoch lässt der Verlauf auf die prinzipielle Richtigkeit der Ergebnisse schließen, was für einen qualitativen Vergleich ausreicht.

Ähnlich ist es für das Grundzustandsniveau \tilde{E}_Ω in Abbildung 15 (c), welches zum 0-ten Niveau in (d) korrespondiert. Auch hier scheint der Verlauf zu stimmen und Abweichungen folgen aus denselben systematischen Fehlern.

Hingegen weist $\tilde{E}_1^+(\tilde{L})$ starke Unterschiede zum Niveau 1 auf. Diese können aber auf die, für die 2-Punkt-Funktion $\tilde{c}_1^+(\tilde{t})$ offensichtlich zu klein gewählte Bingröße zurückgeführt werden (Abb. 8). Dies führt zu Fluktuationen in der abfallenden 2-Punkt-Funktion für $\tilde{t} \gg 0$, wodurch der χ^2 -Fit größere Fehler aufweist. Eine Berechnung der Streuphase erweist sich an diesem Niveau ohne weitere Feinjustierungen als wenig sinnvoll.

Die Ergebnisse verdeutlichen die Schwierigkeiten bei Gitterrechnungen. Obwohl im Vergleich zu der in Abschnitt 4.1 verwendeten Schrittweite, $\Delta L = 0.1$, die hier benutzte, $\Delta\tilde{L} = 0.5$, größer ist und somit weniger Werte produziert werden, sind die Gitterrechnungen deutlich rechenintensiver. Auch die Wahl der Parameter für jedes \tilde{L} erweist sich trotz eines vorhandenen Richtwertes (4.9) als schwierig und führt zu Abweichungen. Die Ergebnisse können ohne Extrapolation kaum weiterverwertet werden.

Die Berechnungen nur der drei niedrigsten Niveaus des Energiespektrums für dieses relativ simple, eindimensionale, quantenmechanische Problem mit Gitterrechnungen verdeutlichen die Schwierigkeit der Untersuchung von Resonanzen, mit welcher man in der QCD konfrontiert ist. Da in der QCD keine Schrödingergleichung vorhanden ist, die mit der Shooting-Methode relativ einfach gelöst werden kann, muss man die numerisch deutlich anspruchsvolleren Pfadintegrale verwenden.

5 Zusammenfassung und Ausblick

Mit den hier vorgestellten Methoden können Resonanzen in der QM untersucht werden. Die Ergebnisse für die betrachteten Beispiele zeigen Eigenschaften auf, welche auf Resonanzen in der QCD übertragen werden können. Demnach äußern sie sich durch einen charakteristischen Verlauf im Spektrum der Energieniveaus in Abhängigkeit einer räumlichen Periode. Die Lüscher-Methode liefert unter bestimmten Bedingungen die Zusammenhänge, welche für die Bestimmung von Masse und Lebensdauer einer Resonanz benötigt werden. Diese sind natürlich in der QCD wesentlich verschieden von den hier präsentierten. Dennoch wird die prinzipielle Vorgehensweise deutlich. Ziel ist die Bestimmung der Streuphase, welche bei der Resonanzenergie einen Phasensprung aufweist. Aus dieser können dann die physikalischen Größen gewonnen werden. Allerdings sind die Methoden, welche für die Untersuchung von Resonanzen in der QCD verwendet werden, deutlich komplizierter und praktisch anspruchsvoller.

Bei den hier durchgeführten Gitterrechnungen fehlen Extrapolationen, welche zu besseren Ergebnissen führen könnten. Der hier gezeigte, qualitative Vergleich könnte somit genauer ausgeführt werden. Hierbei muss man sich nicht auf die ersten drei Niveaus beschränken, sondern kann auch höher liegende mithilfe von Korrelationsmatrizen berechnen.

Diese Arbeit stellt eine vorbereitende Untersuchung für Berechnungen von Resonanzen mit der Gitter-QCD dar. Erste Schritte, wie die Berechnung von Korrelationsfunktionen für das Meson $a_0(980)$ sind bereits in Arbeit.

Literaturverzeichnis

- [1] C. Morningstar, “*Exploring Excited Hadrons*”, PoS LATTICE 2008, (2008)
[arXiv:0810.4448 [hep-lat]].
- [2] F. Schwabl, “*Quantenmechanik, eine Einführung*”, Springer-Verlag, 7. Auflage, (2007).
- [3] M. Lüscher, “*Volume Dependence of the Energy Spectrum in Massive Quantum Field Theories. 2. Scattering States*”, Commun. Math. Phys. **105** 153-188, (1986).
- [4] L. H. Ryder, “*Quantum Field Theory*”, Cambridge University Press, 2. Auflage, (1996).
- [5] S. Gutzwiller, “*Scattering phase shift for elastic two pion scattering and the rho resonance in lattice QCD*”, Dissertation, (2012)
[http://epub.uni-regensburg.de/26029/1/diss_simone_gutzwiller.pdf].
- [6] M. Wagner, O. Philipsen, S. Lottini, “*Quantenfeldtheorie II*”, Skript zur Vorlesung QFT2, (2013).
- [7] M. Wagner, “*Numerische Methoden der Physik*”, Skript zur Vorlesung NUMP, (2011/12).
- [8] S. Prelovsek, C. B. Lang, D. Mohler, “*Scattering phase shift and resonance properties on the lattice: An Introduction*”, Bled Workshops in Physics. Vol. 12 No. 1, (2011)
[arXiv:1110.4520 [hep-ph]].