

BACHELORARBEIT

$\begin{array}{c} {\bf Resonanzen \ in} \\ \overline{b}\overline{b}ud\mbox{-}{\bf Tetraquark\mbox{-}Systemen} \\ {\bf basierend \ auf \ statisch\mbox{-}leichten} \\ {\bf Gitter\mbox{-}QCD\mbox{-}Vier\mbox{-}Quark\mbox{-}Potentialen} \end{array}$

Martin Pflaumer

Institut für Theoretische Physik Goethe-Universität Frankfurt am Main

20. September 2016

Betreuer und Erstgutachter Prof. Dr. Marc Wagner Goethe-Universität Frankfurt am Main Zweitgutachter Prof. Dr. Francesco Giacosa Jan Kochanowski University Kielce

Selbständigkeitserklärung

Ich versichere hiermit, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Quellen und Hilfsmittel verfasst habe. Wörtlich übernommene Sätze oder Satzteile sind als Zitat belegt, andere Anlehnungen, hinsichtlich Aussage und Umfang, unter Quellenangabe kenntlich gemacht. Die Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen und ist nicht veröffentlicht. Sie wurde nicht, auch nicht auszugsweise, für eine andere Prüfungs- oder Studienleistung verwendet.

Frankfurt am Main, 20. September 2016

Martin Pflaumer

Zusammenfassung

In dieser Arbeit werden durch die Bestimmung der Streuamplitude und des daraus resultierenden totalen Wirkungsquerschnitts dreidimensionale sphärisch-symmetrische Potentiale auf die Existenz von Resonanzen untersucht. Am Beispiel des harmonischen Oszillators wird das Auftreten einer Resonanz diskutiert und die Vorgehensweise zur Bestimmung essentieller Parameter präsentiert. Schließlich werden mit dieser Methodik $\bar{b}\bar{b}ud$ -Tetraquark-Systeme untersucht und sowohl mögliche Bindungszustände als auch Resonanzen bestimmt.

Inhaltsverzeichnis

1	Ein	leitung		1
2	Mot	tivatio	n	3
3 Theoretische Grundlagen		che Grundlagen	5	
	3.1	Eigenz	zustände der Schrödinger-Gleichung	6
	3.2	Partia	lwellen-Entwicklung	7
	3.3	Streup	hasen	8
	3.4	Resona	anzen	9
4	Nur	neriscl	ne Methoden	12
	4.1	Allgen	neine Vorbereitungen	12
	4.2	Bindu	ngszustände mittels Shooting-Verfahren	14
	4.3	Numer	rische Bestimmung von Resonanzen	14
	4.4	Bestin	nmung der Resonanzenergie und der Lebensdauer	15
5	Har	monis	cher Oszillator	17
6	$\bar{b}\bar{b}$ -P	otenti	al	22
	6.1	Möglio	che Quantenzahlen	23
		6.1.1	Drehimpuls des Anti-Diquarks $l_b = 0$	24
		6.1.2	Drehimpuls des Anti-Diquarks $l_b = 1$	24
		6.1.3	Drehimpuls des Anti-Diquarks $l_b = 2$	25
	6.2	Absch	ätzung von statistischem und systematischem Fehler	26
	6.3	Bindu	ngszustände	28
	6.4	Reson	anzen	29
		6.4.1	Skalares Iso-Singulett $(ud - du)/\sqrt{2}$	30
		6.4.2	Vektorielles Iso-Triplett $uu, (ud + du)/\sqrt{2}, dd$	34
		6.4.3	Skalares Iso-Singulett $(s^{(1)}s^{(2)} - s^{(2)}s^{(1)})/\sqrt{2}$	36
7	Zus	ammei	nfassung und Ausblick	38
A	nhan	g		40

Α	Zusa	ammenhang zu dimensionslosen Größen	40
в	Aus	führliche Herleitungen	41
	B.1	Radialfunktion für große Abstände	41
	B.2	Streuamplitude	42
	B.3	Wirkungsquerschnitt	42
	B.4	Phasenverschiebung	43
\mathbf{C}	Res	onanzdiagramme	44
	C.1	Oszillator-Topf	44
	C.2	$\overline{b}\overline{b}$ -Potential	45
D	Zus	ammenstellung der Ergebnisse	47
\mathbf{E}	E Literaturverzeichnis		

1 Einleitung

In der Elementarteilchenphysik spielen neben Bindungszuständen sogenannte Resonanzzustände eine wichtige Rolle. Nicht jedes System kann stabile gebundene Zustände ausbilden, sodass ein großes Interesse darin besteht, instabile Zustände mit einer endlichen Lebensdauer zu identifizieren und weiterführend zu untersuchen. In diesem Zusammenhang taucht der Begriff der *Resonanz* auf, womit ein temporär gebundener Zustand beschrieben wird, welcher nach einer endlichen Zeitspanne zerfällt. Man spricht hierbei häufig auch von metastabilen Zuständen. Diese werden durch ihre Resonanzmasse und Lebensdauer charakterisiert.

Die theoretische Beschreibung von Bindungen und Interaktionen von Elementarteilchen erfolgt in der *Quanten-Chromo-Dynamik (QCD)*. Bei der vereinfachenden Betrachtung von Teilchen als Wellen bzw. Potentiale lässt sich eine starke Analogie zur *Quantenmechanik* und den dort auftretenden Resonanzen erkennen. In der quantenmechanischen Streutheorie treten als Lösung der *Schrödinger-Gleichung (SG)* für Energien größer null Streuzustände auf. Als Nullenergie wird in dieser Arbeit stets die Energie eines Teilchens in Abwesenheit eines Potentials aufgefasst. Per Definition ist die Energie im potentialfreien Raum somit null. Diese Zustände können Resonanzen aufweisen, welche als Maximum der Streuamplitude in Erscheinung treten.

Bei einer entsprechenden Wahl des Potentials und der in der Schrödinger-Gleichung enthaltenen Masse ist es deshalb möglich, die in der Quantenmechanik auftretenden Resonanzen ebenfalls als Teilchen aufzufassen.

Dies erlaubt nun die Untersuchung der Interaktion zweier B-Mesonen $\bar{b}u$ und $\bar{b}d$ als Streuung an einem effektiven Potential, welche zu einem gebundenen Tetraquark-Zustand führt. Als zugrundeliegendes Potential dient das $\bar{b}\bar{b}$ -Potential in Gegenwart leichter Quarks

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r} e^{-\frac{r^2}{d^2}}$$
(1.1)

welches aus Rechnungen der Gitter-QCD folgt und verschiedene Tetraquark-Zustände beschreibt. α und d sind dabei das jeweilige Potential charakterisierende Parameter. Ziel ist es, für dieses Potential Resonanzen zu finden, welchen in der physikalischen Interpretation metastabile Teilchen entsprechen.

Die Arbeit gliedert sich inhaltlich folgendermaßen:

In *Kapitel 2* werden die Motivation dieser Arbeit dargelegt und die physikalischen Hintergründe basierend auf den Grundlagen der Elementarteilchenphysik diskutiert.

Kapitel 3 erläutert die theoretischen Grundlagen von quantenmechanischen Interaktionen zwischen einer Welle und einem Potential. Einen besonderen Schwerpunkt bildet hierbei die mathematische Herleitung der Streutheorie und das Auftreten von Resonanzen. Die Ausführungen dieses Abschnitts basieren auf dem Lehrbuch "Quantenmechanik I" von F.Schwabl [1].

Im nachfolgenden Kapitel 4 wird die numerische Vorgehensweise zur Bestimmung von Bindungszuständen und Resonanzen vorgestellt. Verwendet werden hierbei das Shooting-

Verfahren zur Berechnung von Bindungszuständen sowie eine wiederholte Anwendung des Runge-Kutta-Algorithmus zur Identifikation möglicher Resonanzen. Die Auswertung der Daten erfolgt u.a. mit einem Breit-Wigner-Fit, welcher mithilfe der C++-Bibliothek "GNU Scientific Library" [10] realisiert wird.

Kapitel 5 untersucht Bindungszustände und Resonanzen in einem harmonischen Oszillator bzw. einem entsprechenden Potentialtopf der Form:

$$V(r) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2(r^2 - a^2) & \text{für } r \le a \\ 0 & \text{für } r > a \end{cases}$$
(1.2)

und erläutert die Bedingungen für ein Auftreten von Resonanzen.

In Kapitel 6 werden schließlich das vorgestellte $\bar{b}\bar{b}$ -Potential für verschiedene Parametersätze auf Bindungszustände und Resonanzen untersucht und die entsprechenden Resultate präsentiert. Zudem werden die möglichen Quantenzahlen des $\bar{b}\bar{b}ud$ -Tetraquark-Systems diskutiert und die verwendete Methodik zur Bestimmung des Fehlers erläutert.

Im abschließenden Kapitel 7 werden die Ergebnisse zusammengefasst sowie ein Ausblick für weiterführende Untersuchungen des \overline{bbud} -Tetraquark-Systems gegeben.

Anhang A stellt die Zusammenhänge zwischen den dimensionslosen Größen der numerischen Rechnung und den physikalischen Größen gesammelt dar.

Anhang B präsentiert ausführlichere Herleitungen zu einigen Formeln, die in den theoretischen Grundlagen eingeführt wurden. Es wird an der entsprechenden Stelle auf die zugehörigen Abschnitte im Anhang verwiesen.

In Anhang C sind weitere erzeugte Graphen aufgeführt, welche die getroffenen Aussagen zusätzlich untermauern.

Abschließend werden in Anhang D alle Ergebnisse für die Resonanzuntersuchungen des $b\bar{b}$ -Potentials gesammelt und in einer Tabelle präsentiert.

2 Motivation

Im Rahmen des Standardmodells der Teilchenphysik lässt sich der Aufbau aller hadronischen Materie auf sechs unterschiedliche Quarks, die dazugehörigen Antiquarks sowie Gluonen zurückführen. Alle aus Quarks bestehenden Teilchen werden unter dem Begriff Hadronen zusammengefasst. Feiner unterscheidet man diese in Baryonen und Mesonen. Ein Baryon besteht aus drei Quarks, ein Meson bezeichnet ein Quark-Antiguark-Paar. Die Bindung der Hadronen beruht auf der starken Kraft und wird in der Quanten-Chromo-Dynamik (QCD) beschrieben. Laut QCD tragen alle Quarks eine Farbladung, welche die Ladung der starken Kraft ist und somit das Analogon zur elektrischen Ladung der elektromagnetischen Kraft bildet. Im Gegensatz zu dieser existieren jedoch drei verschiedene Ladungen (blau, grün, rot), wobei ein Hadron keine Farbladung besitzt. Es ist nach außen farbneutral. Bereits aus Beobachtungen folgt, dass nur Baryonen und Mesonen ein entsprechendes Farb-Singulett besitzen, welches keine resultierende Ladung aufweist [9, S.26 f]. Beschrieben wird dies in der SU(3)-Theorie der QCD. Entsprechend sind dies die einzigen in der Natur realisierten farblosen Quarkkonfigurationen. Aufbauend auf der Quark-Zusammensetzung von Baryonen und Mesonen können jedoch weitere farbneutrale Konfigurationen gefunden werden, welche Tetraquarks und Pentaquarks umfassen.

Solche komplexeren Hadronen nachzuweisen, stellt die Teilchenphysik vor eine große Herausforderung.

Als Tetraquarks werden alle gebundenen Zustände, die aus zwei Quarks und zwei Anti-Quarks bestehen, bezeichnet. Entsprechend existieren hadronische Resonanzen, welche mögliche Kandidaten für Tetraquark-Zustände sind. In aktuellen Untersuchungen wird ein Tetraquark-Zustand betrachtet, welcher aus zwei schweren Anti-Quarks $b\bar{b}$ sowie zwei leichten Quarks ud besteht [2]. Dieser Zustand kann als Interaktion zweier B-Mesonen $(\bar{b}d \text{ und } \bar{b}u)$ oder eines Diquarks (ud) mit einem Anti-Diquark $(\bar{b}\bar{b})$ aufgefasst werden. Die zwei schweren Anti-Quarks $\bar{b}\bar{b}$ werden als unendlich schwer bzw. statisch angenommen, sodass diese Konfiguration durch die HQET ("heavy quark effective theory") beschrieben wird. Hierin werden Spinwechselwirkungen der schweren Quarks vernachlässigt, da diese anti-proportional zur Masse sind.

Diese Voraussetzungen ermöglichen eine auf Gitter-Rechnungen basierende Beschreibung der Wechselwirkung durch ein sogenanntes effektives Potential V(r), welches sich die schweren $b\bar{b}$ -Anti-Quarks gegenseitig erzeugen. Es ist abhängig vom Abstand r der $b\bar{b}$ -Anti-Quarks und wird als $b\bar{b}$ -Potential bezeichnet. Der genaue Potential-Verlauf wird schlussendlich durch die Anwesenheit der leichten Quarks ud und ihre Quantenzahlen festgelegt. Aus Symmetriegründen sind für die leichten Quarks zwei verschiedene Konfigurationen möglich. Es muss das skalare Iso-Singulett $(ud - du)/\sqrt{2}$ mit Isospin I = 0 und Spin der leichten Quarks $j_l = 0$, sowie das vektorielle Iso-Triplett uu, $(ud + du)/\sqrt{2}$, dd mit I = 1 und $j_l = 1$ unterschieden werden.

Neben dem Tetraquark-System \overline{bbud} kann auch das nächst-schwerere Strange-Quark s einen Tetraquark-Zustand mit schweren Anti-Quarks \overline{bb} ausbilden. Symmetrieargumente verbieten allerdings einen Zustand mit symmetrischer Spin-Wellenfunktion. Konzeptionell können jedoch zwei sich unterscheidende Strange-Quarks $s^{(1)}$ und $s^{(2)}$ angesetzt werden, die ein Tetraquark $\overline{bbs}^{(1)}s^{(2)}$ bilden. Dieser Zustand wird in den folgenden Untersuchungen ebenfalls mit einbezogen.

Auf der Grundlage von Rechnungen aus der Gitter-QCD wird das effektive Potential für

die schweren \overline{bb} -Quarks konstruiert [2]. Dieses Potential hat die Form:

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r} e^{-\frac{r^2}{d^2}}$$

$$\tag{2.1}$$

V(r) ist hierbei bereits in dimensionslosen Einheiten angegeben. Die Parameter α und d sind charakteristisch für die jeweilige Wahl des Tetraquark-Zustands und abhängig von Quantenzahlen der leichten Quarks. Die verwendeten Werte entstammen Gitter-Rechnungen [3].

Beabsichtigt ist nun die Analyse, für welche dieser Potential-Parameter bzw. Zustände Resonanzen und somit metastabile Tetraquarks auftreten.

Die Existenz des oben genannten Potentials ermöglicht es, diese Quark-Antiquark-Wechselwirkungen auf Prozesse aus der Quantenmechanik bzw. der Streutheorie zu vereinfachen und mit deren Methoden auf Resonanzen zu untersuchen.

3 Theoretische Grundlagen

Die theoretische Grundlage zur Bestimmung von Resonanzen bildet die quantenmechanische Streutheorie. Hierbei wird untersucht, wie sich ein einlaufendes Teilchen verhält, wenn es auf ein statisches Potential trifft und mit diesem interagiert: Einige Anteile der Welle werden reflektiert, andere transmittiert. Aufgrund des Welle-Teilchen-Dualismus der Quantenmechanik wird jedes Teilchen durch ein Wellenpaket beschrieben, dessen Ausdehnung groß gegenüber dem Streuzentrum, aber klein gegenüber sonstigen Größen wie beispielsweise dem Abstand zu einem möglichen Detektor, ist.

Jedes Wellenpaket kann nach den Eigenzuständen der Schrödinger-Gleichung entwickelt werden. Es lässt sich zeigen, dass diese Eigenfunktionen ebenen Wellen entsprechen. Für die mathematische Betrachtung genügt es folglich, die Streuung einzelner ebener Wellen zu betrachten. Lediglich für die abschließende Interpretation muss beachtet werden, dass ein Wellenpaket vorliegt, welches im Gegensatz zur ebenen Welle räumlich lokalisiert ist. Grund hierfür ist die destruktive Interferenz der einzelnen ebenen Wellen, wodurch sie sich für den restlichen Raum auslöschen. Nur damit wird das Verständnis als Streuung zweier Teilchen ermöglicht.

Bei der folgenden Untersuchung wird eine einlaufende ebene Welle betrachtet, die auf ein statisches attraktives Potential trifft. Aufgrund der kompletten Delokalisierung im Ort ist der Impuls und demnach die Energie der Welle als Folge der Heisenbergschen Unschärferelation exakt bestimmt.

Die angegebenen Energien beziehen sich in dieser Arbeit stets auf die Differenz zum potentialfreien Fall. Per Definition besitzt ein freies Teilchen in Abwesenheit des Potentials daher die Energie E = 0. Beispielsweise führt eine Absenkung der Energie durch den Einfluss des Potentials somit zu negativen Energie
eigenwerten und bezeichnet einen energetisch niedriger angesiedelten Zustand, der folglich energetisch günstiger und deshalb gebunden ist.

Ziel ist nun die Lösung der Schrödinger-Gleichung und die Bestimmung der Energieeigenwerte des Hamilton-Operators. Es müssen zwei Fälle unterschieden werden.

Im ersten Fall betrachten wir einlaufende Wellen mit einer Energie E < 0. Dies entspricht gebundenen Zuständen mit diskreten Energieniveaus, welche als Energie
eigenwerte aus der Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung folgen. Aufgrund der Diskretisierung treten endlich bzw. abzählbar unendlich viele Bindungszustände auf. Die genaue Lage, die Anzahl der Bindungszustände sowie eine mögliche Entartung hängen vom Verlauf des vorliegenden Potentials ab. Im Gegensatz zum eindimensionalen Fall ist es in drei Dimensionen ebenfalls möglich, dass keine Bindungszustände auftreten. Unabhängig vom Potential verschwindet die Wellenfunktion für $r \to \infty$ exponentiell. Die Welle ist deshalb lokal auf den Bereich des Potentials beschränkt, die Wellenfunktion ist reell.

Der zweite Fall behandelt einlaufende Wellen mit einer Energie E > 0. Aufgrund der positiven Energie treten keine Bindungszustände auf, stattdessen kommt es zu Streuzuständen. Anders als bei gebundenen Zuständen ist ihre Wellenfunktion imaginär und verschwindet für $r \to \infty$ nicht. Durch Lösen der Schrödinger-Gleichung kann gezeigt werden, dass die Energieniveaus kontinuierlich sind.

Bei Streuprozessen ist insbesondere die Streumatrix (S-Matrix), welche die Streuamplituden beschreibt und Wahrscheinlichkeitsaussagen über den Übergang vom Ausgangszu-

stand in den Endzustand trifft, von großer Relevanz. Wird die Streuamplitude f_k maximal, so spricht man von *Resonanzstreuung*. Von besonderem Interesse ist deshalb eine genauere Untersuchung der Streuamplitude in Abhängigkeit von der Energie. Treten für das vorliegende Potential neben attraktiven auch repulsive Bereiche auf, so kann die Welle für eine entsprechende Energie in der Nähe der Resonanz das abstoßende Potential durchtunneln und im inneren Bereich einen quasi-gebundenen Zustand einnehmen. Hieraus resultiert ein großer Streuquerschnitt. Nach einer endlichen Zeitspanne wird das Teilchen wieder emittiert und verlässt somit den inneren Bereich des Potentials.

Die folgenden Abschnitte befassen sich mit der mathematischen Herleitung solcher Resonanzen aus der quantenmechanischen Streutheorie. Grundlage hierfür bildet das Lehrbuch "Quantenmechanik I" von F.Schwabl [1, S.333 ff], aus welchem sowohl Formeln als auch Notation entnommen sind.

3.1 Eigenzustände der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

Ausgangspunkt ist die Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung, welche für ein allgemeines Potential $V(\mathbf{x})$, das zu diesem Zeitpunkt nicht sphärisch-symmetrisch sein muss, gelöst werden soll:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x})\right]\Psi_k(\mathbf{x}) = E_k\Psi_k(\mathbf{x}), \quad \text{mit:} \ E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \ge 0 \quad (3.1)$$

mit der Masse m, dem Planckschen Wirkungsquantum \hbar , dem Wellenvektor k sowie dem Potential $V(\mathbf{x})$.

Es handelt sich hierbei um eine Eigenwertgleichung. Formal gelöst werden kann diese durch den Ansatz einer retardierten Greenschen Funktion

$$(\nabla^2 + k^2) G(x) = \delta(x). \tag{3.2}$$

Setzt man diesen Ansatz in die Schrödinger-Gleichung ein, so liefert die in [1, S.334 ff] ausgeführte Rechnung als Lösung für die Eigenzustände:

$$\Psi_k(\mathbf{x}) = e^{i\,\mathbf{k}\mathbf{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} \cdot f_k(\vartheta,\varphi) \tag{3.3}$$

mit:
$$f_k(\vartheta,\varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \,\mathrm{e}^{i\,\mathbf{k'x'}} \,V(\mathbf{x'}) \,\Psi_k(\mathbf{x'})$$
 (3.4)

und:
$$\mathbf{k}' = k \cdot \frac{\mathbf{x}}{r}$$
 (3.5)

Dies bedeutet, dass sich die Wellen zusammensetzen aus einer ebenen Welle und einer auslaufenden Kugelwelle. Die ebene Welle repräsentiert den ungestörten Fall, d.h. die Bewegung der Welle ohne Potential. Die Kugelwelle stellt die Streuung dar, der Term $f_k(\vartheta, \varphi)$ wird als Streuamplitude bezeichnet.

Es lässt sich folgender Zusammenhang zwischen der Streuamplitude und dem Wirkungsquerschnitt herleiten [1, S.338 f]:

$$\sigma = \int d\Omega \, |f_k(\vartheta,\varphi)|^2 \tag{3.6}$$

Dabei bezeichnet σ den Wirkungsquerschnitt und Ω den Raumwinkel.

3.2 Partialwellen-Entwicklung

Die bisherigen Überlegungen sind für allgemeine Potentiale $V(\mathbf{x})$ gültig. Im Folgenden werden nun Zentralpotentiale betrachtet, sodass gilt $V(\mathbf{x}) = V(r)$.

Die vorliegende Lösung (3.3) soll nach Partialwellen entwickelt werden. Ausgangspunkt hierfür ist die Entwicklung einer ebenen Welle nach Kugelfunktionen:

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \left(2l+1\right) j_l(kr) P_l(\cos(\vartheta))$$
(3.7)

Ebenso wird die Streuamplitude entwickelt:

$$f_k(\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos(\vartheta))$$
(3.8)

Aufgrund der sphärischen Symmetrie verschwindet die φ -Abhängigkeit, und in der Entwicklung treten nur ϑ und r als Variablen auf. Die Koeffizienten f_l sind hierbei die Partialwellenamplituden, l steht für die Drehimpulsquantenzahl. Mit $P_l(\cos(\vartheta))$ werden die Legendre-Polynome, mit $j_l(kr)$ die sphärische Bessel-Funktion bezeichnet. Sie bildet zusammen mit der sphärischen Neumann-Funktion die Lösung der Besselschen Differentialgleichung:

$$j_l(z) = (-z)^l \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^l \frac{\sin(z)}{z} \xrightarrow{z \to \infty} \frac{1}{z}\sin(z - \frac{l\pi}{2})$$
(3.9)

$$n_l(z) = (-z)^l \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^l \frac{\cos(z)}{z} \xrightarrow{z \to \infty} -\frac{1}{z}\cos(z - \frac{l\pi}{2})$$
(3.10)

Setzt man (3.7) und (3.8) in (3.3) ein, so erhält man:

$$\Psi_k(\mathbf{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos(\vartheta)) \left(i^l j_l(kr) + \frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r} f_l \right)$$
(3.11)

Die allgemeine Lösung für die Eigenfunktionen der Schrödinger-Gleichung lässt sich mittels Separationsansatz auf folgende Form bringen:

$$\Psi_k(\mathbf{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \left(2l+1\right) R_l(r) P_l(\cos(\vartheta))$$
(3.12)

Dies wird auch als Entwicklung nach Partialwellen bezeichnet.

Wird das Potential für große Entfernungen null bzw. verhält sich gemäß $V(r) < 1/r^2$, so lässt sich für diesen Bereich die Radialfunktion schreiben als:

$$R_{l}(r) = \frac{1}{2} \left(h_{l}^{*}(kr) + e^{2i\delta_{l}(E)} h_{l}(kr) \right)$$
(3.13)

Hergeleitet wird dies im Anhang in Abschnitt B.1.

Hierbei bezeichnen $h_l(kr)$ und $h_l^*(kr)$ die sphärischen Hankel-Funktionen.

$$h_l(z) = j_l(z) + i n_l(z) = -i(-z)^l \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^l \frac{e^{+iz}}{z}$$
(3.14)

$$h_l^*(z) = j_l(z) - i n_l(z) = +i(-z)^l \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^l \frac{e^{-iz}}{z}$$
(3.15)

Dies entspricht der Lösung im potentialfreien Raum. Bei $\delta_l(E)$ handelt es sich um eine Phasenverschiebung, in welcher sich der Einfluss des Potentials ausdrückt. Somit wird deutlich, dass sich die Wirkung des Potentials im Vergleich zur freien Lösung mit $\delta_l = 0$ nur in einer Phasenverschiebung äußert.

Setzt man (3.13) in (3.12) ein und vergleicht dies mit (3.11), so lassen sich die Partialwellenamplituden und infolgedessen die Streuamplitude allein durch die *Streuphase* δ_l ausdrücken:

$$f_l = \frac{\mathrm{e}^{i\delta_l} \cdot \sin(\delta_l)}{k} \tag{3.16}$$

Die Herleitung hierzu ist in Abschnitt B.2 ausgeführt.

Mit Gl. (3.6) lässt sich hieraus der wichtige Zusammenhang zwischen Streuphase und Wirkungsquerschnitt bestimmen:

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2(\delta_l)$$
(3.17)

Hergeleitet wird dies in Abschnitt B.3.

3.3 Streuphasen

Ziel ist es nun, die Streuphase δ_l , welche Informationen über den Einfluss des Potentials auf die einlaufende Welle enthält, genauer zu untersuchen. Voraussetzung für das Potential ist hierbei, dass es kurzreichweitig ist und für r > a verschwindet oder zumindest $V(r) < 1/r^2$ gilt. a ist hierbei die gewählte Potentialgrenze. Ein Beispiel für ein solches Potential ist der sphärische Potentialtopf, dessen Potential für r > a null ist. Vollkommen analog kann die folgende Betrachtung für andere Potentiale, die für r > a verschwinden, durchgeführt werden.

Die Lösung für den Außenraum, d.h. r > a, ist aus dem vorherigen Kapitel bekannt und durch Gl. (3.13) gegeben. Sie wird im Folgenden als $R_l^>(r)$ bezeichnet.

Für den Innenraum r < a muss $R_l^{<}(r)$ als Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung bestimmt werden.

Über die Stetigkeitsbedingungen für $R_l(r)$ und $R'_l(r)$ an der Stelle r = a werden nun Innen- und Außenlösung aneinander angepasst. Durch diese Anpassung ist δ_l eindeutig bestimmt.

Für die Radialfunktion der Innenraumlösung an der Potentialgrenze a wird definiert:

$$\frac{d}{dr}\ln\left(R_l^{<}(r)\right)\Big|_{r=a} \equiv \alpha_l \tag{3.18}$$

Einsetzen von Gl. (3.13) und (3.18) in die Stetigkeitsbedingung und Umformen nach δ_l liefert:

$$\cot(\delta_l) = \frac{dn_l(kr)/dr - \alpha_l n_l(kr)}{dj_l(kr)/dr - \alpha_l j_l(kr)} \bigg|_{r=a}$$
(3.19)

Die ausführliche Herleitung ist im Anhang in Abschnitt B.4 illustriert.

Für kleine Energien k lässt sich dieser Term entwickeln zu:

$$\tan(\delta_l) = \frac{(2l+1)}{[(2l+1)!!]^2} (ka)^{2l+1} \frac{l - a\alpha_l}{l+1 + a\alpha_l}$$
(3.20)

3.4 Resonanzen

Wird in Gl. (3.20) der Nenner 0, so liegt eine Resonanz vor. Dies bedeutet, dass:

$$l + 1 + a\alpha_l = 0 \tag{3.21}$$

Es folgt deshalb $\tan(\delta_l) \longrightarrow \infty$ bzw. $\delta_l = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi$. Die Streuphase δ_l ist dementsprechend ein Vielfaches von $\pi/2$ und der Wirkungsquerschnitt wird nach Gl. (3.17) maximal. Die Bedingung für das Auftreten einer Resonanz bei maximaler Streuamplitude ist folglich erfüllt.

Für den Spezialfall eines sehr tiefen Potentialtopfes mit $ka \ll l \ll qa$, wobei $q = \frac{\sqrt{2m(V_0+E)}}{\hbar}$ lassen sich die Resonanzen näherungsweise analytisch bestimmen. Es ergeben sich für die Streuphase und den Wirkungsquerschnitt folgende Formeln:

$$\tan(\delta_l) = -\frac{\gamma(ka)^{2l+1}}{E - E_R} \tag{3.22}$$

$$\sigma_l = \frac{4\pi (2l+1)}{k^2} \frac{(\Gamma_k/2)^2}{(E - E_R)^2 + (\Gamma_k/2)^2}$$
(3.23)

mit:
$$\gamma = -\frac{1}{[(2l-1)!!]^2} \frac{1}{a\alpha'_l(E_R)}$$
 (3.24)

und:
$$\Gamma_k \equiv 2\gamma (ka)^{2l+1}$$
 (3.25)

Wird Gl. (3.19) in Abhängigkeit von der Energie analytisch oder numerisch gelöst, so kann der maximale Wirkungsquerschnitt und so die Lage der Resonanz bestimmt werden.

Aus Gründen der Vollständigkeit soll an dieser Stelle auf eine weitere mögliche Vorgehensweise zur Bestimmung von Resonanzen hingewiesen und diese am Beispiel des Potentialtopfs verdeutlicht werden.

Man betrachte die Partialwellenamplitude f_l aus Gl. (3.16) in der Form:

$$f_l(k) = \frac{\tan(\delta_l)}{k(1 - i\tan(\delta_l))}$$
(3.26)

Für den Spezialfall des Potentialtopfes kann man nun die Streuphase durch Gl. (3.22) ausdrücken. Es ergibt sich:

$$f_l(k) = \frac{1}{k} \cdot \frac{-\Gamma_k/2}{E - E_R + i\Gamma_k/2} \tag{3.27}$$

Die Streuamplitude weist eine Polstelle bei der Energie

$$E = E_R - i\Gamma_k/2 \tag{3.28}$$

auf. Somit kann die Resonanz statt über das Maximum des Wirkungsquerschnitts ebenfalls über die Lage des Pols in der komplexen Ebene bestimmt werden. Der Term $\Gamma_k/2$ gibt die Entfernung des Pols von der reellen Achse an und ist ein Maß für die Stärke einer Resonanz. Die reelle Komponente entspricht der Resonanzenergie.

Anstatt der Untersuchung der Streuphase kann direkt die S-Matrix und damit verbunden die Streuamplitude auf Polstellen untersucht werden und bietet so einen alternativen Ansatz zur Bestimmung von Resonanzen.

Diese Arbeit konzentriert sich ausschließlich auf die Resonanzuntersuchung mittels Streuphase, die Methodik der Polstellensuche in der S-Matrix wird nicht weiter verfolgt. Für weiterführende Untersuchungen, die über diese Arbeit hinaus gehen, stellt sie jedoch eine interessante Alternative dar.

In der bisherigen theoretischen Betrachtung wurde nicht genauer auf die Drehimpulsquantenzahl l eingegangen, weshalb abschließend kurz deren Einfluss auf die Existenz von Resonanzen beschrieben werden soll.

In den meisten Fällen treten nur für $l \ge 1$ Resonanzen auf, für l = 0 existieren Resonanzen nur in seltenen Fällen und sind nicht sehr scharf. Eine mathematische Bedingung lässt sich herleiten, indem geprüft wird, ob $\sigma_0(E)$ ein Maximum besitzt. Dies existiert genau dann, wenn $\left| d\alpha_0(E)/dE \right|_{E=E_R} \right| > \frac{1}{2\sqrt{E_R}}$.

Neben der mathematischen Bedingung für die Existenz einer Resonanz ist besonders die physikalische Begründung von Interesse.

Als maßgeblicher Einflussfaktor tritt in diesem Zusammenhang das Zentrifugalpotential $V_Z^l(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$ in Erscheinung, welches für eine einlaufende Welle eine Barriere darstellt. In Kombination mit einem anziehenden Potential entstehen infolgedessen klassisch erlaubte und klassisch verbotene Bereiche. Es ist ersichtlich, dass nur für $l \ge 1$ eine entsprechende Potentialbarriere existiert, für l = 0 verschwindet das Zentrifugalpotential und eine Welle wird für alle Energien ähnlich stark transmittiert.

Anschaulich wird eine Resonanzerscheinung, wenn man sich eine auf einen entsprechenden Potential-Wall einlaufende Welle vorstellt. Für die meisten Energien ist der Transmissionskoeffizient sehr gering und die Welle dringt nicht in den inneren Bereich ein. Für bestimmte Energien - in der Nähe der Resonanzenergie - können die Wellen jedoch tief in die innere Zone des Potentials eindringen und sich dort eine entsprechende Zeitspanne $t = \frac{\hbar}{\Gamma}$ aufhalten. Innerhalb dieses Zeitintervalls befindet sich die Welle mit großer Aufenthaltswahrscheinlichkeit im inneren Bereich, das entsprechende Teilchen befindet sich somit in einem gebundenen Zustand. Es handelt sich im Fall einer Resonanz jedoch um einen metastabilen Zustand, welcher nach der gegebenen Zeitspanne zerfällt. Dies bedeutet, dass die Welle sich nicht länger im inneren Bereich des Potentials aufhält, sondern erneut den Potential-Wall durchtunnelt.

4 Numerische Methoden

In diesem Kapitel werden die numerischen Methoden, die zur Erzielung der später aufgeführten Ergebnisse verwendet wurden, erläutert. Es wird dabei auch speziell auf Besonderheiten, die für eine fehlerfreie numerische Durchführung beachtet werden müssen, eingegangen. Zum Einsatz kommen zwei voneinander unabhängige Programme, welche zur Bestimmung von Bindungszuständen bzw. Resonanzen verwendet werden.

4.1 Allgemeine Vorbereitungen

Im ersten Schritt sollen nun die verwendeten Annahmen und mathematischen Herleitungen erläutert werden, welche zur numerischen Umsetzung der Problemstellung notwendig sind. Ziel ist es, die radiale Schrödinger-Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right] R_l(r) = E R_l(r)$$
(4.1)

zu lösen und die radiale Wellenfunktion $R_l(r)$ sowie die Energieeigenwerte zu bestimmen. Mittels der Substitution u(r) = rR(r) lässt sich die Schrödinger-Gleichung auf die Form

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right] u_l(r) = E u_l(r)$$
(4.2)

vereinfachen.

Um eine komplikationslose numerische Auswertung zu ermöglichen, wird diese Gleichung in dimensionslose Koordinaten überführt. Hierzu wird die Substitution $r \longrightarrow \hat{r} = \frac{r}{a}$ durchgeführt. *a* ist hierbei eine Konstante der Dimension Länge, deren genaue Form vom untersuchten Potential abhängt.

Die abschließend verwendete Gleichung lautet somit:

$$\left[-\frac{d^2}{d\hat{r}^2} + \frac{l(l+1)}{\hat{r}^2} + \hat{V}(\hat{r})\right]\hat{u}(\hat{r}) = \hat{E}\,\hat{u}(\hat{r}) \tag{4.3}$$

mit:
$$\hat{V}(\hat{r}) = \frac{2ma^2}{\hbar^2} V(r) , \qquad \hat{E} = \frac{2ma^2}{\hbar^2} E$$
 (4.4)

Für weitere der in Kapitel 3 genannten Parameter gilt schließlich:

$$\hat{k} = ka$$
, $\hat{k}^2 = \hat{E}$, $\hat{\alpha}_l = a\alpha_l$, $\hat{\sigma}_l = \frac{\sigma_l}{a^2}$ (4.5)

Zur Lösung dieser *Differentialgleichung (DGL)* 2. Ordnung werden bei gegebener Energie E zwei Randbedingungen benötigt.

Es lässt sich zeigen, dass diese für u(r) gegeben sind durch:

$$\lim_{r \to 0} u(r) = 0 \tag{4.6}$$

$$\lim_{r \to \infty} u(r) = 0 \tag{4.7}$$

Dementsprechend muss die Wellenfunktion u(r) sowohl im Ursprung als auch im Unendlichen verschwinden. Numerisch treten nun zwei Schwierigkeiten auf:

Erstens, es ist nicht möglich, die zweite Randbedingung in Gl. (4.7) numerisch umzusetzen, da der Wert "Unendlich" nicht fassbar ist. Dieser so entstehende Freiheitsgrad lässt sich in eine Normierungskonstante überführen, welche lediglich den quantitativen Wert der Amplitude verändert, nicht jedoch den qualitativen Verlauf der Wellenfunktion selbst oder die Werte der Eigenenergien. Es ist daher legitim, diese Konstante frei zu wählen, ohne dass die erzielten Ergebnisse davon entscheidend beeinflusst werden.

Die zweite Schwierigkeit bezieht sich auf eine Singularität der Schrödinger-Gleichung im Ursprung. Betrachtet man Gl. (4.3), so erkennt man eine Divergenz des Zentrifugal-Potentials für $r \to 0$, welche eine numerische Auswertung an diesem Punkt unmöglich macht. Als Konsequenz ist die Randbedingung (4.6) numerisch nicht realisierbar.

Um diese Schwierigkeit zu beheben, setzt man zunächst voraus, dass das betrachtete Potential für $r \to \infty$ mindestens wie 1/r verschwindet und im Nullpunkt schwächer als $1/r^2$ divergiert [4, S.105]. Dies lässt sich ausdrücken gemäß:

$$\lim_{r \to \infty} r V(r) = 0 \tag{4.8}$$

$$\lim_{r \to 0} r^2 V(r) = 0 \tag{4.9}$$

Die genannten Anforderungen sind von den meisten bedeutenden Zentralpotentialen erfüllt, eine Ausnahme bildet lediglich das Oszillator-Potential. Insbesondere die in dieser Arbeit untersuchten Potentiale erfüllen diese Voraussetzung.

Man betrachtet nun die DGL (4.2) für $r \rightarrow 0$. Nach Voraussetzung (4.9) divergiert das Potential langsamer als $1/r^2$. Im Limes gegen 0 dominiert somit der Zentrifugal-Term und das Potential kann vernachlässigt werden. Die Radialgleichung vereinfacht sich zu:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right] u_l(r) = E u_l(r)$$
(4.10)

Diese Gleichung wird durch die Ansätze

$$u_l^{(1)}(r) \sim r^{l+1}$$
 und $u_l^{(2)}(r) \sim r^{-l}$ (4.11)

gelöst.

Die Lösung $u_l^{(2)}$ widerspricht der Randbedingung (4.6), sodass nur $u_l^{(1)}$ als valide Lösung bleibt. Mit der dazugehörigen Ableitung sind die Randbedingungen demnach gegeben durch:

$$u_l^{(1)}(r) \sim r^{l+1} \tag{4.12}$$

$$u_l^{(1)}(r) \sim (l+1) \cdot r^l \tag{4.13}$$

Man verwendet deshalb als Anfangswert ein $r_0 = \epsilon$, welches klein ist, sodass Gl. (4.10) angewandt werden kann. Die Randbedingungen folgen nun aus den Funktionswerten von Gl. (4.12) bzw. (4.13) und legen somit Wert und Steigung der Wellenfunktion u(r) fest. Um die Stabilität der Lösung zu gewährleisten, darf eine Variation von ϵ keine Veränderung im finalen Resultat hervorrufen. Entsprechend wird eine Stabilitätsuntersuchung durchgeführt, sodass die Wahl schließlich auf $\epsilon = 10^{-6}$ fällt. Für die numerische Umsetzung ist weiterhin die Form des Potentials von Bedeutung. Alle in dieser Arbeit untersuchten Potentiale zeichnen sich aus durch:

$$V(r) = \begin{cases} \tilde{V}(r) & \text{für } r \le a_G \\ 0 & \text{für } r > a_G \end{cases}$$
(4.14)

Dabei ist a_G die Grenze des Potentialtopfes mit beliebigem Potential im Innenraum. Die Lösung des Außenraums ist bekannt und wie in Kapitel 3 gezeigt durch die sphärische Bessel- bzw. Neumann-Funktion (Gl. (3.9) und Gl. (3.10)) gegeben.

4.2 Bindungszustände mittels Shooting-Verfahren

Im ersten Schritt werden mögliche gebundene Zustände des betrachteten Potentials identifiziert und deren diskrete Energie
eigenwerte bestimmt. Hierzu wird das sogenannte Shooting-Verfahren verwendet, um die Schrödinger-Gleichung für E < 0 zu lösen.

Dieses besteht aus einem Runge-Kutta-Algorithmus [5] und einer anschließenden Nullstellen-Suche, welche in dieser Arbeit durch ein Newton-Raphson-Verfahren realisiert wird [5]. Die Methodik beinhaltet eine Variation des gesuchten Parameters, in diesem Fall der Energie, bis dieser die gegebenen Randbedingungen bis zur geforderten Genauigkeit erfüllt.

Bezogen auf das hier untersuchte Problem sieht diese Vorgehensweise folgendermaßen aus: Die Randbedingungen der Wellenfunktion sind festgelegt durch die freie Außenraum-Lösung an der Stelle $r = a_G$. Im Bereich $r > a_G$ wird diese Lösung realisiert durch die Hankelfunktion (3.14), welche für $r \to \infty$ verschwindet, und deren Ableitung. Zusätzlich muss die Bedingung u(0) = 0 bzw. Gl. (4.12) erfüllt werden. Ausgehend von der freien Lösung für $r = a_G$ wird nun mit einer zunächst beliebig gewählten Startenergie E_{Start} mithilfe des Runge-Kutta-Algorithmus die Wellenfunktion im Innenraum bis zum gewählten Endwert ϵ entwickelt. Die Energie E wird durch das Newton-Raphson-Verfahren im Anschluss entsprechend angepasst und das Runge-Kutta-Verfahren wiederholt, bis die Randbedingung aus Gl. (4.12) erfüllt ist. Die so ermittelte Energie entspricht einem Bindungszustand des Potentials.

Um die Konvergenz des Algorithmus zu gewährleisten, wird die Startenergie E_{Start} durch einen groben Energiescan bestimmt, welcher den Betrag der Wellenfunktion im Ursprung bzw. bei ϵ gegen die Energie aufträgt. Ein Minimum charakterisiert hierbei die Lage eines Bindungszustandes.

4.3 Numerische Bestimmung von Resonanzen

Im zweiten Schritt wird nun angestrebt, die Streuphasen bzw. damit implizit die Resonanzen eines beliebigen sphärisch-symmetrischen Potentials V(r) mit Hilfe numerischer Methoden zu bestimmen. Hierzu muss die Radialgleichung Gl. (4.3) für den Innenraum gelöst werden.

Die numerische Lösung dieser DGL erfolgt durch das Runge-Kutta-Verfahren mit den aus Gl. (4.12) bzw. (4.13) folgenden Anfangsbedingungen für $r_0 = \epsilon$. Der Runge-Kutta-Algorithmus wird somit auf den Bereich $[\epsilon, a_G]$ angewandt. Für den Außenraum wird die

Wellenfunktion durch die freie Lösung (3.13) beschrieben. Als weitere freie Parameter treten in Gl. (4.3) die Drehimpulsquantenzahl l und die Energie E auf. Die Lösungen für verschiedene l sind unabhängig voneinander, sodass die Auswertungen für jedes l separat durchgeführt werden. Ziel der Untersuchung ist es, Phasenverschiebung bzw. Wirkungsquerschnitt in Abhängigkeit von der Energie E anzugeben. Es wird deshalb die DGL für eine Vielzahl von Energien in einem Intervall $[E_{min}, E_{max}]$ gelöst und die Radialfunktion bestimmt. Für jede Energie lässt sich gemäß Gl. (3.18) der Faktor α_l und mit Gl. (3.19) auf analytische Weise δ_l berechnen. Damit ist der Wirkungsquerschnitt σ_l nach Gl. (3.17) bestimmt.

Die Lage des Maximums des Wirkungsquerschnitts entspricht nun der Resonanzenergie, die Halbwertsbreite dieser Verteilung enthält Informationen über die Lebensdauer der Resonanz.

4.4 Bestimmung der Resonanzenergie und der Lebensdauer

In einem weiteren Schritt müssen nun aus den gewonnenen Daten die Lage des Maximums des Wirkungsquerschnitts σ_{max} und die Halbwertsbreite quantitativ extrahiert werden. Von Bedeutung ist hierbei, dass die Lebensdauer der Resonanz umgekehrt proportional zur Breite des Peaks ist, das bedeutet, je schmaler der Peak, desto langlebiger ist die Resonanz. Es gilt $t = \frac{\hbar}{\Gamma}$. Ausgedrückt wird diese Halbwertsbreite durch Γ . Oft spricht man auch von "voller Breite auf halber Höhe", im englischen "full width at half maximum", kurz FWHM.

Da die diskreten Datenpaare bekannt sind, kann zunächst die Position des Maximums des Wirkungsquerschnitts direkt abgelesen werden, dies entspricht der Resonanzenergie E_R . Der maximale Wirkungsquerschnitt σ_{max} ist demnach gegeben und die Daten können nach den beiden Positionen von $\sigma_{max}/2$ durchsucht werden. Die dazugehörigen Energien bilden die gesuchten Werte, die zur Bestimmung der Halbwertsbreite benötigt werden. Γ ergibt sich folglich aus der Differenz dieser beiden Energiewerte.

Bei einer numerischen Durchführung der Resonanzbestimmung können sowohl E_R als auch Γ durch eine entsprechend kleine Wahl der Energieschritte äußerst genau bestimmt werden. Liegt jedoch keine analytisch oder numerisch auswertbare Funktion vor, beispielsweise bei experimentellen Datensätzen, müssen die Parameter auf andere Weise bestimmt werden. Hierzu eignet sich ein Fit mit der sogenannten Breit-Wigner-Verteilung [9, S.142ff], welche die Wirkungsquerschnitts-Kurve im Bereich der Resonanz gut beschreibt. Unter physikalischen Gesichtspunkten ist deshalb eine Bestimmung der Parameter durch den Breit-Wigner-Fit von großem Interesse, um so die erzielten Ergebnisse in Relation setzen zu können.

Grundlegend ist hierfür die Breit-Wigner-Verteilung, bei der es sich um eine auf einer Cauchy-Verteilung basierenden Wahrscheinlichkeitsverteilung mit der folgenden Form handelt:

$$\sigma(E) = \frac{A}{2\pi} \frac{\Gamma}{(E - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2}$$
(4.15)

 Γ und E_R sind die gesuchten Größen der Halbwertsbreite bzw. Resonanzenergie. A bezeichnet eine Konstante, die aus Normierungsgründen eingeführt werden muss. Für A = 1 ist die Verteilung auf 1 normiert. Da dies für die erzeugten Graphen jedoch nicht gilt, muss die Breit-Wigner-Formel mit der Konstanten A entsprechend angepasst werden. Somit wird garantiert, dass σ_{max} aus den Daten mit dem entsprechenden Wert aus dem Fit übereinstimmt. Darüber hinaus steckt keine physikalische Bedeutung in der Größe A.

Die numerische Durchführung des Fits erfolgt im C++-Code, welchem die Daten der Resonanzuntersuchung übermittelt werden. Verwendet wird hierzu die Bibliothek "GNU Scientific Library" [10], die eine Vielzahl an Funktionen zur Durchführung numerischer Berechnungen zur Verfügung stellt. In diesem Fall wird die Methode des nicht-linearen-Least-Square-Fits verwendet.

Grundlage hierfür ist die Minimierung der Fehlerquadrate. Mathematisch bedeutet dies, dass das Minimum des Ausdrucks

$$\sum_{i=1}^{n} (f(x_i, a_p) - y_i)^2 \tag{4.16}$$

gesucht wird.

Hierbei ist $f(x_i, a_p)$ die verwendete Fit-Funktion, a_p bezeichnen die p-Parameter der Funktion, im Fall des Breit-Wigner-Fits ist p = 3 und die a_p sind E_R , Γ und A. x_i und y_i bezeichnen die Wertepaare, die durch die numerische Berechnung bestimmt wurden. Es wird nun für alle x_i die Differenz zwischen dem numerischen Wert y_i und dem Funktionswert $f(x_i, a_p)$ an dieser Stelle bestimmt und quadratisch gewichtet. Schließlich werden alle Fehler aufsummiert. Diese Summe wird durch Anpassung der Parameter a_p minimiert, somit werden die Parameter für den vorliegenden Datensatz optimiert.

Das Paket <*gsl/gsl_multifit_nlin.h>* stellt die grundlegenden Funktionen bereit, welche zur numerischen Durchführung eines nicht-linearen Fits benötigt werden.

5 Harmonischer Oszillator

In diesem Kapitel sollen nun am Beispiel eines modifizierten harmonischen Oszillators die in den vorherigen Kapiteln beschriebenen Verfahren angewandt und so Entstehung und Auftreten von Resonanzen diskutiert werden.

Betrachtet wird hierbei ein nach unten verschobenes Oszillator-Potential, dessen Wert ab dem Nulldurchgang verschwindet.

Mathematisch wird das Potential dargestellt durch:

$$V^{(1)}(r) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2(r^2 - a_G^2) & \text{für } r \le a_G \\ 0 & \text{für } r > a_G \end{cases}$$
(5.1)

Die in Kapitel 4.1 eingeführte Konstante a wird in diesem Spezialfall mit

$$a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tag{5.2}$$

identifiziert.

Man überführt (5.1) mit dieser Wahl von *a* gemäß Gl. (4.4) in ein dimensionsloses Potential $\hat{V}^{(1)}(\hat{r})$:

$$\hat{V}^{(1)}(\hat{r}) = \begin{cases} (\hat{r}^2 - \hat{a}_G^2) & \text{für } \hat{r} \le \hat{a}_G \\ 0 & \text{für } \hat{r} > \hat{a}_G \end{cases}$$
(5.3)

In Abb. 5.1 sind sowohl der normale harmonische Oszillator als auch der modifizierte harmonische Oszillator - im weiteren Verlauf auch *Oszillator-Topf* genannt - mit ihren Bindungszuständen abgebildet.



Abbildung 5.1: Bindungszustände mit Eigenenergien und Wellenfunktionen; links für den harmonischen Oszillator; rechts für den Oszillator-Topf mit $\hat{a}_G = 3$ (Drehimpulsquantenzahlen: rot l = 0, grün l = 1, blau l = 2, violett l = 3)

Für den in der rechten Graphik präsentierten Oszillator-Topf wurde $\hat{a}_G = 3$ verwendet. Dargestellt sind die Wellenfunktionen der verschiedenen Bindungszustände, ihre Nulllage charakterisiert ihre entsprechende Bindungsenergie. Farblich unterschieden sind die Bindungszustände mit verschiedenen Drehimpulsquantenzahlen l, wobei alle Bindungszustände mit $l \leq 3$ und einer Bindungsenergie $\hat{E} \leq 9$ eingezeichnet wurden. Die Eigenzustände des harmonischen Oszillators links in Abb. 5.1 entsprechen den analytisch berechenbaren Energieeigenwerten $E_{n,l} = \hbar \omega \left(2n + l + \frac{3}{2}\right) = \hbar \omega \left(N + \frac{3}{2}\right)$ mit N = 2n + l bzw. mit Gl. (4.4):

$$\hat{E}_{n,l} = 2\left(2n+l+\frac{3}{2}\right) = 2\left(N+\frac{3}{2}\right)$$
(5.4)

wobei l die Drehimpulsquantenzahl ist und n als Hauptquantenzahl die Eigenzustände bei festem l durchnummeriert. Die zweite Gleichung in (5.4) impliziert die Entartung der Eigenenergien, welche in Abb. 5.1 für die Eigenzustände bei $\hat{E} = 7$ und $\hat{E} = 9$ deutlich zu erkennen ist.

Vergleicht man nun den daneben abgebildeten modifizierten Oszillator-Topf mit dem normalen Oszillator, so lässt sich eine identische Struktur der Bindungszustände identifizieren. Lediglich die sich nun über der Nulllinie befindenden Energiezustände treten nicht mehr als gebundene Zustände in Erscheinung. Das heißt, die entsprechenden Bindungszustände existieren nicht mehr. In diesem Bereich kommt es nun vielmehr zu Streuzuständen, welche nicht weiter durch ein diskretes Energiespektrum charakterisiert werden. In diesem Spektrum ist es nun von besonderem Interesse, wann und bei welchen Energien Resonanzen erscheinen.

Ein Vergleich der Eigenenergien der in Abb. 5.1 dargestellten Potentiale zeigt, dass die Energieeigenwerte lediglich leicht verändert sind, wie aus Tabelle 5.1 ersichtlich wird.

Energieeigenwerte $\hat{E}_{n,l}$	harmonischer Oszillator	Oszillator-Topf
$\hat{E}_{0,0}$	3	2.999
$\hat{E}_{1,0}$	7	6.952
$\hat{E}_{0,1}$	5	4.995
$\hat{E}_{1,1}$	9	8.731
$\hat{E}_{0,2}$	7	6.976
$\hat{E}_{0,3}$	9	8.893

Tabelle 5.1: Energieeigenwerte des harmonischen Oszillator und des Oszillator-Topf

Alle Zustände sind etwas tiefer gebunden als im normalen Oszillator-Potential. Insbesondere höher liegende Zustände weisen eine stärkere Abweichung von den bekannten Werten auf. Aus diesem Grund befindet sich der Zustand $\hat{E}_{1,1}$ noch im Potential und ist deshalb gebunden, allerdings nur sehr schwach. Gleiches gilt für den Zustand $\hat{E}_{0,3}$.

In der gewählten speziellen Konfiguration ist der Eigenwert $\hat{E}_{1,1}$ somit von besonderem Interesse. Bei einer Verringerung der Potential-Tiefe, welche durch das Quadrat von \hat{a}_G gegeben ist, erwartet man nun, dass dieser Bindungszustand verschwindet, er wird aus dem bindenden Bereich des Potentials "herausgeschoben". Dieser bisherige Bindungszustand, der sich nun knapp über der Nulllinie befindet, sollte folglich als Resonanz in Erscheinung treten. Entsprechend erwartet man dieses Verhalten auch für $\hat{E}_{0.3}$.

Für die zugehörige Untersuchung wählt man als Potentialgrenze $\hat{a}_G = 2.9$ und als maximale Energie $\hat{E}_{max} = 2.5$. Es lässt sich zeigen, dass für l = 1 nur ein gebundener Zustand existiert, für l = 3 existiert hingegen keiner mehr.

Unter Anwendung der in 4.3 beschriebenen Techniken wurde dieses Potential auf Resonanzen untersucht. Die erzielten Ergebnisse für l = 1 sind in Abb. 5.2 dargestellt.



Abbildung 5.2: Oszillator-Topf mit $\hat{a}_G = 2.9$ und l = 1; links: Phasenverschiebung $\delta_l(\hat{E})$; rechts: Wirkungsquerschnitt $\hat{\sigma}_l(\hat{E})$

Analog kann die gleiche Resonanzuntersuchung für l = 2 und l = 3 durchgeführt werden. Wie erwartet zeigt sich für l = 2 kein Phasensprung und daher keine Resonanz. Dies ist nicht verwunderlich, da kein Bindungszustand aus dem Potential "herausgeschoben" wurde (vergleiche Abb. 5.1). Für l = 3 ist jedoch der zuvor einzige Bindungszustand aus dem Bindungsbereich verschwunden. Erwartungsgemäß erscheint dieser als Resonanz, wie in Abb. 5.3 zu erkennen ist. Die Resonanzenergie liegt hierbei etwas höher als für l = 1, Phasensprung und Peak entsprechen noch klarer der Idealform einer Breit-Wigner-Verteilung. Die größere Energie kann mit dem stärkeren Zentrifugalpotential erklärt werden. Durch den höheren Potential-Wall wird mehr Energie benötigt, um in den inneren Potentialbereich zu gelangen.

In Tabelle 5.2 sind die Resonanzenergien zusammengefasst. Addiert man hierzu die Potentialtiefe $\hat{a}_G^2 = 8.41$, so stimmen diese Werte gut mit den Eigenenergien der entsprechenden Zustände aus Tabelle 5.1 überein.



Abbildung 5.3: Oszillator-Topf mit $\hat{a}_G = 2.9$ und l = 3; links: Phasenverschiebung $\delta_l(\hat{E})$; rechts: Wirkungsquerschnitt $\hat{\sigma}_l(\hat{E})$

Schwächt man das Potential durch eine Verringerung von \hat{a}_G weiter ab, so steigt die Resonanzenergie an, der bisherige Bindungszustand bzw. die Resonanz entfernt sich stärker

Drehimpulsquantenzahl	Resonanz-Energie \hat{E}_R
l = 1	0.063
l = 3	0.389

Tabelle 5.2: Resonanzenergien für l = 1 und l = 3 bei $\hat{a}_G = 2, 9$

von der Nulllinie. Dieses Verhalten ist in Abb. 5.4 für $\hat{a}_G = 2.9$ und $\hat{a}_G = 2.8$ illustriert. Dargestellt sind sowohl die Wellenfunktionen der gebundenen Zustände als auch die der Resonanzen. Vergleicht man diese Graphiken mit Abb. 5.1 rechts, so erkennt man, wie ein Bindungszustand schrittweise in eine Resonanz übergeht, wenn er den Bindungsbereich des Potentials verlässt. Die Resonanzkurven für $\hat{a}_G = 2.8$ sind im Anhang in Abb. C.1 angeführt.



Abbildung 5.4: Bindungszustände und auftretende Resonanzen für den Oszillator-Topf mit: links $\hat{a}_G = 2.9$, rechts $\hat{a}_G = 2.8$ (Drehimpulsquantenzahlen: rot l = 0, grün l = 1, blau l = 2, violett l = 3)

Erweitert man den zu untersuchenden Energiebereich, so ist es möglich, Resonanzen höherer Ordnung zu finden. Für die Parameter l = 1, $\hat{a}_G = 2.8$ und $\hat{E}_{max} = 25$ lässt sich ein weiterer Peak im Wirkungsquerschnitt erkennen, welcher mit einem Bindungszustand höherer Ordnung identifiziert werden kann. Sowohl die Änderung in der Phasenverschiebung als auch der Peak im Wirkungsquerschnitt sind nur sehr schwach ausgeprägt, weshalb man hier von einer sehr schwachen Resonanz ausgehen kann. Die ermittelte Resonanzenergie liegt bei $\hat{E}_R = 6.68$. Beachtet man die Potential-Tiefe von $\hat{V}^{(1)}(0) = -\hat{a}_G^2 = -7.84$, dessen Betrag zum Vergleich mit den Bindungszuständen des normalen harmonischen Oszillator hinzu addiert werden muss, so berechnet sich der Wert des Energieniveaus zu $\hat{E} = 14.52$. Berücksichtigt man eine zunehmende "Verschmierung" des Energiezustandes, so lässt sich die Resonanz mit dem darauffolgenden Energieeigenzustand des harmonischen Oszillators $\hat{E}_{2,1} = 13$ identifizieren.

Während der Phasensprung in Abb. 5.5 nur sehr schwach als leichte Änderung der Steigung angedeutet ist, erscheint das Maximum im Wirkungsquerschnitt deutlich erkennbar. Eine entsprechend schwache Ausprägung dieser Resonanz ist aufgrund der hohen Energie gut verständlich.



Abbildung 5.5: Oszillator-Topf mit $\hat{a}_G = 2.8$ und l = 1 für einen höheren Energiebereich; links: Phasenverschiebung $\delta_l(\hat{E})$; rechts: Wirkungsquerschnitt $\hat{\sigma}_l(\hat{E})$

6 bb-Potential

In diesem Abschnitt erfolgt die Untersuchung eines $\overline{b}\overline{b}ud$ -Tetraquark-Systems auf Bindungszustände und Resonanzen. Die nachfolgenden Rechnungen basieren auf Ergebnissen, die mit Gitter-QCD-Verfahren ermittelt wurden [2]. Die Interaktion zweier B-Mesonen ($\overline{b}u$ und $\overline{b}d$) kann mittels einer Born-Oppenheimer-Approximation folgendermaßen genähert werden: Die \overline{b} -Quarks werden als unendlich schwer bzw. statisch angenommen und erzeugen sich wechselseitig ein effektives Potential, welches durch die Anwesenheit der leichten Quarks zudem modifiziert wird. Aus Fit-Funktionen des Quark-Modells folgt dieses zu [2, S.4]:



 $V(r) = -\frac{\alpha}{r} e^{-\frac{r^2}{d^2}}$ (6.1)

Abbildung 6.1: \overline{bb} -Potential für $\alpha = 0.34$ und d = 0.45 fm

Die das Potential charakterisierenden Parameter α und *d* entstammen ebenfalls den Rechnungen der Gitter-QCD und stehen in direktem Bezug zu den auftretenden leichten Quarks und deren Quantenzahlen im untersuchten Tetraquark-System.

Betrachtet man das Potential (6.1) für große r, so zeigt sich, dass es sehr schnell verschwindet. Entsprechend ist die in Gl. (4.14) verwendete Form, bei der das Potential für große Abstände auf 0 gesetzt wird, anwendbar. Bei ausreichend großer Wahl von \hat{a}_G sind Fehler deshalb vernachlässigbar.

Gelöst werden soll nun die radiale Schrödinger-Gleichung für diese Potentiale. Zur Überführung der Differentialgleichung in dimensionslose Größen wird in Analogie zur Gitter-QCD die dort entnommene Gitterkonstante a = 0.079 fm für qq = ud bzw. a = 0.042 fm für $qq = s^{(1)}s^{(2)}$ verwendet. Für die auftretenden Größen gelten weiterhin die Zusammenhänge (4.4) und (4.5).

Für die in der Schrödinger-Gleichung auftauchende Masse wird im Fall qq = ud die reduzierte B-Mesonen-Masse mit $m_{B,red} = \frac{1}{2} \cdot m_B = \frac{1}{2} \cdot 5279$ MeV verwendet, für den Fall $qq = s^{(1)}s^{(2)}$ die reduzierte B_S-Masse mit $m_{B_S,red} = \frac{1}{2} \cdot m_{B_S} = \frac{1}{2} \cdot 6276$ MeV.

6.1 Mögliche Quantenzahlen

Vor der Suche nach Bindungszuständen und der Resonanzanalyse sollen die Quantenzahlen der Tetraquark-Systeme analysiert werden. Hierzu muss die Gesamtwellenfunktion betrachtet werden, welche sich aus den Wellenfunktionen für Ort, Farbe bzw. Colour, Spin und Flavour bzw. Isospin zusammensetzt:

$$|\Psi\rangle = |Ort\rangle \otimes |colour\rangle \otimes |Spin\rangle \otimes |flavour\rangle \tag{6.2}$$

Die folgende Analyse gilt sowohl für Bindungszustände als auch für Resonanzen.

Die Untersuchung spaltet sich in zwei Teile auf: Die Wellenfunktionen des Anti-Diquarks aus \overline{bb} und die des Diquarks *ud* können mit Gl. (6.2) jeweils separat betrachtet werden. Für beide Diquarks muss die Gesamtwellenfunktion nach dem Pauli-Prinzip antisymmetrisch sein.

Es wurde gezeigt [2, S.2 f], dass für einen gebundenen *bbud*-Zustand, d.h. ein Tetraquark, das Anti-Diquark \overline{bb} in einem Colour-Triplett auftreten muss. Nur dieses ist attraktiv und kann somit zu einem gebundenen Zustand führen. Damit das Gesamt-System farbneutral ist, müssen die leichten Quarks *ud* in einem Colour-Anti-Triplett vorliegen. Für ein Colour-Triplett bzw. Colour-Anti-Triplett folgt eine antisymmetrische Colour-Wellenfunktion. Es wird folgende Notation verwendet:

	Spin	Drehimpuls	Gesamt- drehimpuls	Isospin
leichtes Diquark	s_l	l_l	j_l	i_l
schweres Anti-Diquark	s_b	l_b	j_b	i_b

Mit diesen Größen folgt für den Gesamtdrehimpuls des Tetraquark-Systems:

$$|j_l - j_b| \le J \le |j_l + j_b| \tag{6.3}$$

Realisiert werden kann ein Tetraquark mit dem entsprechenden Quarkinhalt *bbud* durch zwei B-Mesonen. Dies schließt sowohl die skalaren B-Mesonen B⁺ und B⁰ als auch die Vektor-B-Mesonen B^{*+} und B^{*0} ein. Durch die Kombination verschiedener B-Mesonen können Tetraquark-Systeme $\bar{b}\bar{b}ud$ mit unterschiedlichen Gesamtdrehimpulsen J erzeugt werden.

Für das leichte Diquark können Ort und Spin nicht unterschieden werden, sodass nur der Gesamtdrehimpuls bzw. Gesamtspin j_l von Bedeutung ist. In der folgenden Betrachtung wird deshalb nur j_l berücksichtigt, nicht jedoch die Orts- bzw. Spin-Komponenten l_l und s_l .

Zur Untersuchung der Parität des Tetraquarks muss man dieses als Kombination zweier Mesonen betrachten. Die B-Mesonen, aus denen das Tetraquark-System besteht, besitzen eine negative Parität [3, S.5]. Diese Einzel-Paritäten der B-Mesonen müssen zur Bestimmung der Parität des Tetraquarks mit hinzugezogen werden und tragen jeweils mit dem Faktor (-1) zur Gesamtparität bei. Berücksichtigt werden muss zusätzlich der Einfluss des Gesamtdrehimpuls L durch den Term $(-1)^L$. Für das vorliegende Tetraquark-System ist $L = l_b$ durch den Drehimpuls des Anti-Diquarks gegeben. Die Parität des Gesamtsystems ergibt sich dementsprechend zu:

$$P = (-1)^{l_b} \cdot (-1) \cdot (-1) = (-1)^{l_b} \tag{6.4}$$

Da für das leichte Diquark ud Ort und Spin nicht unterschieden werden können, betrachtet man die Wellenfunktionen dieser beiden Anteile kombiniert als Gesamtspin-Wellenfunktion. Bekannt ist weiterhin die Antisymmetrie der Colour-Wellenfunktion. Entsprechend muss die Kombination von Gesamtspin und Flavour zu einer symmetrischen Wellenfunktion führen, damit die Gesamtwellenfunktion antisymmetrisch bleibt. Dies ermöglicht zwei Konfigurationen: Symmetrisch in Gesamtspin und Flavour oder antisymmetrisch in Gesamtspin und Flavour. Im symmetrischen Fall beträgt der Isospin deshalb $i_l = 1$, der Gesamtspin der leichten Quarks summiert sich zu $j_l = 1$. Man spricht von einem vektoriellen Iso-Triplett, die möglichen Flavour-Konfigurationen sind uu, $(ud + du)/\sqrt{2}$, dd. Für den antisymmetrischen Fall ergibt sich $i_l = 0$ und $j_l = 0$. Dies wird als skalares Iso-Singulett bezeichnet und liegt in der Form $(ud - du)/\sqrt{2}$ vor. Es kann gezeigt werden, dass das skalare Iso-Singulett attraktiver als das vektorielle Iso-Triplett ist [2, S.2 f].

6.1.1 Drehimpuls des Anti-Diquarks $l_b = 0$

Man betrachte nun das Anti-Diquark \overline{bb} , dessen Gesamtwellenfunktion ebenfalls antisymmetrisch sein muss. Dieses ist im Flavour stets symmetrisch, sodass $i_b = 0$ folgt. Der Gesamt-Isospin setzt sich deshalb nur aus dem Isospin des leichten Diquarks zusammen:

$$I = i_l \tag{6.5}$$

Aus der räumlichen Symmetrie für $l_b = 0$ folgt dann, dass der Spin ebenfalls symmetrisch sein muss und es ergibt sich $s_b = 1$. Für den Gesamtdrehimpuls des Anti-Diquarks \overline{bb} gilt insofern $j_b = l_b + s_b = 1$.

Man bestimme nun die Quantenzahl $I(J^P)$, wobei $J = j_b + j_l$ der Gesamtdrehimpuls des Systems und P die Parität ist. Aus der Bedingung $P = (-1)^{l_b}$ mit dem räumlichen Drehimpuls des Anti-Diquarks $l_b = 0$ folgt eine positive Parität.

Es ergibt sich für das skalare Iso-Singulett mit $j_l = 0$:

$$I(J^P) = 0(1^+) \tag{6.6}$$

Für das vektorielle Iso-Triplett existieren drei Möglichkeiten, wie $j_l = 1$ und $j_b = 1$ zu J koppeln können. Es hat deshalb folgende Quantenzahlen:

$$I(J^P) \in \{1(0^+), 1(1^+), 1(2^+)\}$$
(6.7)

6.1.2 Drehimpuls des Anti-Diquarks $l_b = 1$

Für das Auftreten von Resonanzen muss weiterhin der Fall eines nicht verschwindenden Drehimpuls in der Schrödinger-Gleichung untersucht werden. Da die Schrödinger-Gleichung die Bewegung der schweren Anti-Quarks $b\bar{b}$ beschreibt, bezieht sich die dort auftretende Drehimpulsquantenzahl l auf den Drehimpuls der schweren Quarks l_b . Dies lässt den Schluss zu, dass sich die bereits diskutierten Quantenzahlen des leichten Diquarks nicht verändern und das Diquark ud weiterhin in den beiden möglichen Konfigurationen eines skalaren Iso-Singuletts und eines vektoriellen Iso-Tripletts vorliegen kann.

Eine Veränderung ergibt sich jedoch für das Anti-Diquark \overline{bb} : Da für $l_b = 1$ die Ortswellenfunktion antisymmetrisch ist, muss der Spin ebenfalls antisymmetrisch sein und deshalb zu $s_b = 0$ koppeln. Es folgt der Gesamtdrehimpuls $j_b = 1$. Die Parität ergibt sich erneut über $P = (-1)^{l_b}$, sie ist wegen $l_b = 1$ in diesem Fall jedoch negativ.

Für das skalare Iso-Singulett mit dem Gesamtdrehimpuls $j_l = 0$ folgt somit:

$$I(J^P) = 0(1^{-}) \tag{6.8}$$

Beim vektoriellen Iso-Triplett existieren erneut drei Möglichkeiten zur Kopplung des Gesamtdrehimpuls J, demnach sind die Quantenzahlen:

$$I(J^P) \in \{1(0^-), 1(1^-), 1(2^-)\}$$
(6.9)

6.1.3 Drehimpuls des Anti-Diquarks $l_b = 2$

Abschließend soll der Fall $l_b = 2$ betrachtet werden. Erneut bleiben die Quantenzahlen der leichten Quarks unverändert. Aus $l_b = 2$ folgt, dass die Ortswellenfunktion des Anti-Diquarks $b\bar{b}$ symmetrisch ist, entsprechendes muss auch für die Spinwellenfunktion gelten, sodass sich $s_b = 1$ ergibt. Dies ermöglicht für die Kopplung zum Gesamtdrehimpuls j_b die drei Möglichkeiten $1 \le j_b \le 3$. Die Parität ist wegen $l_b = 2$ wieder positiv.

Für das skalare Iso-Singulett mit $j_l = 0$ sind die folgenden Quantenzahlen möglich:

$$I(J^P) \in \{0(1^+), 0(2^+), 0(3^+)\}$$
(6.10)

Für das vektorielle Iso-Triplett gibt es aufgrund des Drehimpuls der leichten Quarks $j_l = 1$ weitere Möglichkeiten der Kopplung, sodass sich als mögliche Quantenzahlen ergeben:

$$I(J^P) \in \{1(0^+), 1(1^+), 1(2^+), 1(3^+), 1(4^+)\}$$
(6.11)

Für höhere Drehimpulse können die Quantenzahlen in analoger Vorgehensweise bestimmt werden. Für $l_b = 3$ (antisymmetrisch) muss $s_b = 0$ (antisymmetrisch) sein, entsprechend ist $j_b = 3$, die Parität ist wieder negativ. Für $l_b = 4$ ist die Wellenfunktion symmetrisch, für den Spin folgt deshalb $s_b = 1$ (symmetrisch). Damit gilt $3 \le j_b \le 5$ und die Parität wird positiv.

In den Tabellen 6.1 und 6.2 sind alle Quantenzahlen bis $l_b \leq 2$ für den skalaren Iso-Singulett- bzw. vektoriellen Iso-Triplett-Zustand des leichten Diquarks zusammengefasst.

l_b	s_b	j_b	P	$I(J^P)$
0	1	1	+	$0(1^{+})$
1	0	1	-	$0(1^{-})$
2	1	1, 2, 3	+	$0(1^+), 0(2^+), 0(3^+)$

Tabelle 6.1: mögliche Quantenzahlen für das skalare Iso-Singulett mit verschiedenen Drehimpulsen $l = l_b$. Es gilt: $I = i_l = 0$; $j_l = 0$; $i_b = 0$

l_b	s_b	j_b	Р	$I(J^P)$
0	1	1	+	$1(0^+), 1(1^+), 1(2^+)$
1	0	1	-	$1(0^{-}), 1(1^{-}), 1(2^{-})$
2	1	1, 2, 3	+	$1(0^+), 1(1^+), 1(2^+), 1(3^+), 1(4^+)$

Tabelle 6.2: mögliche Quantenzahlen für das vektorielle Iso-Triplett mit verschiedenen Drehimpulsen $l = l_b$. Es gilt: $I = i_l = 1$; $j_l = 1$; $i_b = 0$

Möchte man einen bindenden Zustand mit dem schwereren Strange-Quark betrachten, so besteht die Schwierigkeit, dass aufgrund der Flavour-Symmetrie nur ein Spin-Triplett-Zustand möglich ist. Eine antisymmetrische Spinwellenfunktion würde dem Pauli-Prinzip widersprechen. Konzeptionell kann man jedoch zwei hypothetische Strange-Quarks $s^{(1)}$ und $s^{(2)}$ im entsprechenden Massenbereich annehmen, welche mit antisymmetrischem Flavour auftreten können, und so die Rechnungen für ein skalares Iso-Singulett durchführen. Da diese Konfiguration in Gitterrechnungen für eine Resonanz vielversprechende Potential-Parameter geliefert hat [2, S.7 ff], wird dieser Fall in der vorliegenden Arbeit ebenfalls untersucht (siehe 6.4.3). Die Quantenzahlen entsprechen denen des skalaren Iso-Singuletts mit den leichten Quarks qq = ud.

6.2 Abschätzung von statistischem und systematischem Fehler

In Tabelle 6.3 sind die Quark-Zusammensetzungen, der resultierende Isospin sowie die aus Gitter-Rechnungen stammenden zugehörigen Mittelwerte der Parameter α und d zusammengestellt [2, S.7; 3, S.22]. Im Folgenden wird auch von "Parameter-Mittelwerten" gesprochen, wenn die hier präsentierten Werte verwendet werden.

qq	Spin	α	$d \; [\mathrm{fm}]$
$(ud-du)/\sqrt{2}$	skalar	$0.34^{+0.03}_{-0.03}$	$0.45{}^{+0.12}_{-0.10}$
$uu, (ud + du)/\sqrt{2}, dd$	vektoriell	$0.29{}^{+0.05}_{-0.06}$	$0.16{}^{+0.05}_{-0.02}$
$(s^{(1)}s^{(2)} - s^{(2)}s^{(1)})/\sqrt{2}$	skalar	$0.27{}^{+0.08}_{-0.05}$	$0.20{}^{+0.10}_{-0.10}$

Tabelle 6.3: Parameter α und d für \overline{bb} -Potentiale [2, S.7; 3, S.22]

Zur Berechnung dieser Parameter wurden in Gitter-Rechnungen verschiedene χ^2 minimierende Fits für das Potential (6.1) durchgeführt [2, S.6 f]. Es folgt hieraus, dass die Parameter des \overline{bb} -Potentials Fehlern unterworfen sind. Entsprechend sind auch die Ergebnisse für die Energie E_R und die Halbwertsbreite Γ fehlerbehaftet.

Es soll in diesem Abschnitt deshalb die Vorgehensweise zur Bestimmung des Fehlers in E_R und Γ erklärt werden. Dieser Gesamtfehler setzt sich aus einem statistischen und einem systematischen Fehler zusammen.

Zunächst soll kurz das Jackknife-Verfahren erläutert werden, welches zur Bestimmung des statistischen Fehlers herangezogen wird und eine wichtige Grundlage für die Erzeugung der vorliegenden Gitter-Daten liefert.

Das Jackknife-Verfahren arbeitet mit einem Sample bestehend aus N Werten. Von diesem

Sample $x_1, ..., x_N$ werden nun jeweils ein Wert eliminiert und somit N reduzierte Samples aus je N - 1 Werten erzeugt [6]. Für jedes dieser reduzierten Samples wird wiederum der Mittelwert gebildet, ebenso wie der Mittelwert des Ausgangs-Samples:

$$\tilde{x}_{(i)} = \frac{1}{N-1} \sum_{k \neq i} x_k \tag{6.12}$$

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \tilde{x}_{(i)} \tag{6.13}$$

Der Fehler nach dem Jackknife-Verfahren wird nun bestimmt gemäß:

$$\sigma_J^2 = \frac{N-1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\tilde{x}_{(i)} - \bar{x} \right)^2 \tag{6.14}$$

und entspricht folglich einer Varianz. Zieht man hieraus die Wurzel, erhält man die gesuchte Standardabweichung.

Man muss sich nun mit den vorliegenden Daten und Rechnungen der Gitter-QCD vertraut machen, die zur Bestimmung der Potential-Parameter α und d durchgeführt wurden [2, S.6 f].

Um systematische Fehler berücksichtigen zu können, wurde eine große Zahl minimierender Fits für unterschiedliche Bereiche durchgeführt. Die Fits wurden jeweils auf reduzierten Samples ausgeführt, sodass über den Jackknife-Fehler statistische Schwankungen bestimmt werden können.

Aus den Gitter-Rechnungen liegen nun die verschiedenen reduzierten Samples jeweils als Datei vor, wobei die zum gleichen Fit-Bereich gehörigen Daten jeweils in der gleichen Zeile stehen.

Für die Berechnung der Fehler in E_R und Γ wird folgendermaßen vorgegangen:

Für jedes reduzierte Sample des gleichen Fits, also der gleichen Zeile *i*, wird über die Methodik aus Kapitel 4 Resonanzenergie und Halbwertsbreite berechnet. Über das Jackknife-Verfahren kann nun der statistische Fehler bestimmt werden, wobei man berücksichtigen muss, dass bereits reduzierte Samples vorliegen, die Ausgangswerte in den Dateien somit die $\tilde{x}_{(i)}$ sind. Davon ausgehend wird über Gl. (6.13) und (6.14) der statistische Fehler bestimmt.

Es liegt nun ein sogenanntes *Fullsample* vor, in dem für jeden Fit-Bereich die Mittelwerte der Energien und Halbwertsbreiten sowie die dazugehörigen statistischen Fehler aufgeführt sind.

Als zentraler Wert wird nun der Median dieser Verteilung gewählt, der zum Median gehörige statistische Fehler wird als absoluter statistischer Fehler angesehen. Der systematische Fehler wird so bestimmt, dass 68% der Werte im akzeptieren Rahmen liegen. Dies bedeutet, dass der untere Fehler beim 16., der obere Fehler beim 84. Perzentil der vorliegenden Daten des Fullsamples liegt.

Aus dem statistischen und dem systematischen Fehler wird abschließend durch quadratische Addition gemäß:

$$\sigma_{ges} = \sqrt{\sigma_{stat}^2 + \sigma_{syst}^2} \tag{6.15}$$

der Gesamtfehler berechnet. Dieser ist in der folgenden Auswertung stets angegeben.

Zur Vereinfachung der Rechnung wurde in dieser Arbeit darauf verzichtet, die χ^2 -Gewichtung der einzelnen Fits mit einzubeziehen.

Die Analyse der Potentiale gliedert sich nun in zwei Teile:

Zunächst werden Lösungen der Schrödinger-Gleichung für Energien kleiner null für die drei Potential-Konfigurationen gesucht und somit etwaige Bindungszustände bestimmt. Im darauffolgenden Teil betrachtet man Streuzustände und untersucht die Tetraquark-Zustände auf Resonanzen.

6.3 Bindungszustände

Gebundene Zustände werden mit dem in Abschnitt 4.2 präsentierten Shooting-Verfahren ermittelt. Die mögliche Existenz und grobe Lage eines Bindungszustandes wird vorher durch einen Energie-Scan untersucht.

Die Parameter für diese Berechnung werden für die Potentialgrenze zu $\hat{a}_G = 20$ und die Schrittgröße zu $h = 10^{-2}$ festgelegt. Für diese Wahl ist die Stabilität der Lösung gewährleistet. Für den Energie-Scan wird das Intervall [-0.2, 0] mit einer Schrittgröße von $h_E = 0.005$ gewählt. Aufgrund des zunehmenden Zentrifugalterms bei ansteigender Drehimpulsquantenzahl l und einer infolgedessen schwächer werdenden Bindung wird die Suche nach Bindungszuständen zunächst für l = 0 durchgeführt.

Aus der Auswertung der Energie-Scans folgt, dass weder das vektorielle Iso-Triplett von ud noch das skalare Iso-Singulett von $s^{(1)}s^{(2)}$ einen Bindungszustand aufweisen. Das skalare Iso-Singulett von ud besitzt für l = 0 hingegen einen entsprechenden gebundenen Zustand. Führt man das Shooting-Verfahren mit $\hat{E}_{Start} = -0.07$ durch, so ergibt sich die Bindungsenergie zu:

qq	Spin	\hat{E}_B	E_B [MeV]
$(ud-du)/\sqrt{2}$	Skalar	$-0.077^{+0.037}_{-0.037}$	$-91.48_{-43.69}^{+43.77}$

Tabelle 6.4: Bindungsenergie des skalaren Iso-Singulett
s $(ud-du)/\sqrt{2}$ für Drehimpulsquantenzahll=0

Vergleicht man dieses Ergebnis mit dem entsprechenden Resultat aus Rechnungen der Gitter-QCD [3, S.22], bei welcher die Bindungsenergie zu -90^{+43}_{-36} berechnet wurde, so stimmen diese Werte im Rahmen des Fehlers gut überein, obwohl das in dieser Arbeit bestimmte Resultat ohne Gewichtung der einzelnen Fits berechnet wurde. Die Existenz dieses Bindungszustands kann deshalb durch die Rechnungen der Quantenmechanik bestätigt werden.

Für höhere Drehimpulsquantenzahlen $l \geq 1$ existieren auch für das skalare Iso-Singulett keine Bindungszustände.

Diese Ergebnisse lassen sich gut mit den Kenntnissen über das $b\bar{b}$ -Potential in Einklang bringen. Das skalare Iso-Singulett zeichnet sich durch eine größere Attraktivität aus als das vektorielle Iso-Triplett. Entsprechend erwartet man, dass für das skalare Iso-Singulett

die Bindung stärker ist. In diesem Fall tritt nur für das skalare Iso-Singulett ein Bindungszustand auf, für das vektorielle Iso-Triplett jedoch nicht.

Die hier berechnete Bindungsenergie gibt an, wie stark die Energie des gebundenen Systems im Vergleich zu den ungebundenen Teilchen herabgesetzt ist. Für den gebundenen Tetraquark-Zustand folgt die Masse demnach zu $m_{\bar{b}\bar{b}ub} = 2 \cdot m_B + E_B$, wobei die Bindungsenergie negativ ist, die Gesamtmasse des Tetraquark-Systems somit geringer wird als die Summe der Einzelmassen der B-Mesonen. Der gebundene Zustand ist folglich energetisch günstiger.

6.4 Resonanzen

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der Resonanzuntersuchung für die drei Konfigurationen des $\bar{b}\bar{b}$ -Potentials präsentiert.

Es wird hierzu das in Abschnitt 4.3 beschriebene Verfahren angewandt, um zunächst die Streuphasen $\delta_l(E)$ zu bestimmen und anschließend daraus den totalen Wirkungsquerschnitt $\sigma_l(E)$ zu berechnen. Tritt eine Resonanz auf, so zeichnet sich diese durch einen Phasensprung und ein Maximum im Wirkungsquerschnitt aus.

Als Parameter werden für diese Analyse eine Schrittgröße des Runge-Kutta-Verfahrens von $h = 10^{-1}$ sowie eine Potentialgrenze von $\hat{a}_G = 25$ gewählt, beide Parameter sind auf Stabilität getestet.

Grundlage für die folgenden Berechnungen bildet die in Abschnitt 6.2 beschriebene Vorgehensweise, die erzeugten Graphen basieren auf den Ergebnissen, die mit den Parameter-Mittelwerten aus Tabelle 6.3 ermittelt wurden.

Resonanzenergie und Halbwertsbreite können aus den Daten direkt herausgelesen werden. Zudem wird der vorgestellte Breit-Wigner-Fit für die Umgebung des Maximums angewendet. Das Intervall wird hierbei durch die abgelesenen Werte $E_{R,les}$ und Γ_{les} festgelegt zu $[E_{R,les} - \Gamma_{les}/4, E_{R,les} + \Gamma_{les}/4]$. Die wünschenswerte Umgebung von $E_{R,les} \pm \Gamma_{les}/2$ kann nicht realisiert werden, da für diesen Bereich teilweise keine Daten zur Verfügung stehen.

Um die physikalische Aussagekraft der Ergebnisse einschätzen zu können, wird nicht allein die Resonanzenergie und Halbwertsbreite für die Parameter-Mittelwerte berechnet, sondern zusätzlich der statistische und systematische Fehler mit einbezogen. Die Vorgehensweise zur Ermittlung der Ergebnisse wurde in Abschnitt 6.2 beschrieben, die im Folgenden angegebenen Fehler beschreiben den Gesamtfehler und umfassen statistische und systematische Ungenauigkeiten.

Die bestimmte Resonanzenergie E_R gibt analog zur Bindungsenergie E_B an, wie sich die Masse des gebundenen Systems von der Summe der Einzelmassen unterscheidet. Die Gesamtmasse folgt zu $m_{\overline{bb}ub} = 2 \cdot m_B + E_R$. Man beachte, dass $E_R > 0$, sodass die Gesamtmasse im gebundenen Zustand größer ist als die Summe der Massen der einzelnen Teilchen. Aufgrund der höheren Gesamtenergie bildet sich bei einer Resonanzerscheinung nur ein metastabiler Zustand, welcher nach einer endlichen Zeitspanne wieder in die energetisch günstigeren B-Mesonen zerfällt. Es treten deshalb im Ausgangskanal die gleichen Teilchen wie im Eingangskanal auf. Wie bereits in Abschnitt 6.1 diskutiert sind dies - abhängig von der Drehimpulsquantenzahl - die B-Mesonen B⁺, B⁰, B^{*+} oder B^{*0}.

6.4.1 Skalares Iso-Singulett $(ud - du)/\sqrt{2}$

Als erster Tetraquark-Zustand wird das skalare Iso-Singulett mit qq = ud untersucht. Da die Resonanz-Berechnungen für verschiedene Drehimpulsquantenzahlen l unabhängig voneinander sind, werden im Folgenden die Ergebnisse für die unterschiedlichen l separat präsentiert. Die Gitterkonstante ist mit a = 0.079 fm festgelegt, das untersuchte Energie-Intervall beschränkt sich auf $[10^{-3}, 5]$ bei einer Schrittgröße von $d\hat{E} = 10^{-3}$.

Zunächst wird der Fall l = 0 betrachtet. Die Untersuchung für das Parameterpaar $\alpha = 0.34$ und d = 0.45 fm aus Tabelle 6.3 liefert nach einer entsprechenden Auswertung der Phasenverschiebung $\delta_l(E)$ bzw. des Wirkungsquerschnitts $\sigma_l(E)$ die in Abb. 6.2 dargestellten Graphen.



Abbildung 6.2: skalares Iso-Singulett $(ud - du)/\sqrt{2}$ für l = 0; links: Phasenverschiebung $\delta_l(E)$; rechts: Wirkungsquerschnitt $\sigma_l(E)$

Aus dieser graphischen Auswertung wird ersichtlich, dass für l = 0 keine Resonanz auftritt: Weder ein Phasensprung noch ein Maximum im Wirkungsquerschnitt sind erkennbar. Dieses Resultat stimmt mit den Vorüberlegungen aus Abschnitt 3.4 überein. Im Rahmen der Auswertung der Daten lässt sich zeigen, dass die dort hergeleitete Bedingung für das Auftreten einer Resonanz in diesem Fall nicht erfüllt ist. Aufgrund des verschwindenden Zentrifugalpotentials tritt keine Potentialbarriere auf, die einen klassisch verbotenen inneren Bereich abgrenzt. Entsprechend wird eine einlaufende Welle für alle Energien ähnlich stark transmittiert und es tritt keine Resonanz-Streuung auf. Es existiert kein Bereich, in dem sich ein temporär gebundener Zustand ausbilden kann, folglich kommt es nicht zu einer Resonanzerscheinung.

Man betrachte nun höhere Drehimpulsquantenzahlen, beginnend mit der Untersuchung für l = 1. In diesem Fall wird das zu untersuchende Energie-Intervall auf den Bereich $[10^{-4}, 0.5]$ reduziert und die Schrittgröße auf $d\hat{E} = 10^{-4}$ gesetzt, um eine bessere Auflösung des relevanten Bereichs zu erhalten.

In Abb. 6.3 sind die Streuphase $\delta_l(E)$ sowie der totale Wirkungsquerschnitt $\sigma_l(E)$ für die Parameter-Mittelwerte $\alpha = 0.34$ und d = 0.45 dargestellt. Zusätzlich ist der Breit-Wigner-Fit für den Wirkungsquerschnitt eingezeichnet.



Abbildung 6.3: skalares Iso-Singulett $(ud - du)/\sqrt{2}$ für l = 1; links: Phasenverschiebung $\delta_l(E)$; rechts: Wirkungsquerschnitt $\sigma_l(E)$

Betrachtet man das Phasendiagramm, so ist der auftretende Phasensprung eindeutig identifizierbar. Ebenso zeigt sich ein klares Maximum im Wirkungsquerschnitt.

Die Resultate für die Resonanzenergie und die Halbwertsbreite für l = 1 sind in Tabelle 6.5 zusammengestellt. Ebenso ist der Gesamtfehler basierend auf statistischem und systematischem Fehler angegeben.

	ausgelesener Wert	gefitteter Wert
\hat{E}_R	$0.0662^{+0.0587}_{-0.0538}$	$0.0744 {}^{+0.0608}_{-0.0547}$
E_R [MeV]	$78.21_{-63.54}^{+69.32}$	$87.98^{+71.87}_{-64.66}$
Γ	$0.165^{+0.161}_{-0.144}$	$0.114^{+0.104}_{-0.091}$
$\Gamma \; [\text{MeV}]$	$195.45^{+190.92}_{-169.79}$	$135.14_{-107.53}^{+122.69}$

Tabelle 6.5: Resonanzenergie und Halbwertsbreite des skalaren Iso-Singuletts $(ud-du)/\sqrt{2}$ für die Drehimpulsquantenzahl l = 1

Bei der Betrachtung dieser Ergebnisse fällt die Diskrepanz zwischen den aus den Datensätzen ausgelesenen Werten und den mittels Fit bestimmten Parametern auf. Dabei beläuft sich die Abweichung in der Resonanzenergie auf ca. 15%, für die Halbwertsbreite weichen die Ergebnisse mit ca. 30% noch deutlicher voneinander ab. Die über die beiden Verfahren bestimmten Resultate stimmen somit nur in einem sehr groben Rahmen bzw. nur in der Größenordnung überein. Die ausgelesenen Ergebnisse lassen sich sehr genau bestimmen, sodass nun die Frage aufkommt, weshalb der Breit-Wigner-Fit diese Werte relativ unpräzise reproduziert.

Es zeigt sich in diesem Zusammenhang die Problematik einer entsprechenden Anpassung: Die Breit-Wigner-Verteilung gilt nur näherungsweise in der Umgebung des Maximums und beschreibt die Kurve deshalb nur im Bereich der Resonanz gut. Zudem handelt es sich um eine symmetrische Funktion. Betrachtet man Abb. 6.3, erkennt man eine relativ große Breite, wodurch die nur für kleine Abstände vom Maximum geltende Näherung ungenau wird. Insbesondere wird die unsymmetrische Verteilung der numerisch bestimmten Kurve deutlich: Für große Energien fällt die Kurve langsamer ab, für kleine Energien ist sie hingegen relativ steil. Diese beiden Punkte unterscheiden sie von einer Breit-Wigner-Verteilung und haben bereits für den Bereich von $E_{res} \pm \Gamma/2$ eine so große Relevanz, dass der Fit entscheidend beeinflusst wird. Durch den schwächeren Abfall rechts des Maximums verschiebt sich der gefittete Wert für die Energie zu größeren Werten. Gleichzeitig ist die Breit-Wigner-Kurve stets schmaler angesetzt als der tatsächliche Verlauf, sodass der gefittete Wert für die Halbwertsbreite immer kleiner ist als der ausgelesene.

Würde man den Fit-Bereich weiter verkleinern, so könnte die Lage des Maximums genauer bestimmt werden, bei einer Verschlechterung des Werts für die Halbwertsbreite. Eine entsprechende Diskrepanz zwischen ausgelesenem Wert und Fit zeigt sich auch für die folgenden Resonanzuntersuchungen. Bei Anwendung des Breit-Wigner-Fits muss deshalb stets berücksichtigt werden, dass aufgrund der Abweichung vom idealen Breit-Wigner-Kurvenverlauf die Ergebnisse beeinflusst werden. Für die hier gegebenen Kurven ist die Resonanzenergie deshalb immer etwas größer, die Halbwertsbreite immer niedriger als die ausgelesenen Werte.

Insbesondere wenn die Parameter nicht auf andere Weise zugänglich sind, muss deshalb sehr genau bedacht werden, inwiefern der Fit die Kurve repräsentiert und in welchem Rahmen die Fit-Parameter quantitativ verlässliche Ergebnisse liefern.

Um die Qualität der Ergebnisse einzuschätzen, muss weiterhin der angegebene Fehler beachtet werden. Für die Resonanzenergie ist dieser relativ groß - er liegt bei fast 90% des berechneten Wertes - sodass keine fundierte Aussage über die tatsächliche exakte Resonanzmasse getroffen werden kann. Eine quantitative Aussage bezüglich dieser Resonanz ist deshalb nicht möglich. Entsprechendes gilt auch für die Halbwertsbreite, deren Fehler in der gleichen prozentualen Größenordnung liegt. Trotzdem können physikalisch relevante Aussagen getroffen werden: Qualitativ kann man folgern, dass eine Resonanz selbst bei maximalem Fehler existiert und für diese Potential-Konfiguration somit ein metastabiler Zustand auftreten wird.

Man betrachte abschließend sowohl die ausgelesenen als auch die gefitteten Ergebnisse unter Berücksichtigung ihres jeweiligen Fehlers. Dabei zeigt sich, dass die Resultate jeweils im Fehlerrahmen der anderen Bestimmungs-Methode liegen. Trotz der bereits diskutierten Abweichungen der beiden Auswertungsverfahren kann deshalb von einem qualitativ übereinstimmenden Ergebnis gesprochen werden.

Aus der Betrachtung des harmonischen Oszillator in Kapitel 5 ist bekannt, dass Bindungszustände höherer Energie ebenfalls als Resonanzen auftreten können. Die Existenz weiterer Resonanzen-Erscheinungen lässt sich daher für das $b\bar{b}$ -Potential nicht à priori ausschließen. Um etwaige zusätzliche Resonanzen zu finden, wird der untersuchte Energie-Bereich auf $\hat{E} \in [2, 40]$ vergrößert und nach einem möglichen Maximum im Wirkungsquerschnitt gesucht. Es lässt sich jedoch kein derartiger Peak lokalisieren, sodass davon ausgegangen werden muss, dass ein entsprechender Zustand im Energie-Spektrum bereits zu stark "verschmiert" ist und deshalb nicht als Resonanz auftritt. Hieraus folgt, dass die bereits identifizierte Resonanz nicht in einem energetisch höher angeregten Zustand existieren kann.

Analog wird nun die Resonanz-Untersuchung für l = 2 durchgeführt. In diesem Fall wird wieder das Energie-Intervall $[10^{-3}, 5]$ gewählt und die Schrittgröße auf $d\hat{E} = 10^{-3}$ gesetzt. Die entsprechende Auswertung der Daten ist in Abb. 6.4 und Tabelle 6.6 zusammengestellt. Die Graphen beziehen sich erneut auf die mit den Parameter-Mittelwerten aus Tabelle 6.3 bestimmten Ergebnisse. Zusätzlich ist der verwendete Breit-Wigner-Fit eingezeichnet, mit welcher die Kurve des Wirkungsquerschnitts gefittet wurde.



Abbildung 6.4: skalares Iso-Singulett $(ud - du)/\sqrt{2}$ für l = 2; links: Phasenverschiebung $\delta_l(E)$; rechts: Wirkungsquerschnitt $\sigma_l(E)$

	ausgelesener Wert	gefitteter Wert
\hat{E}_R	$0.273^{+0.152}_{-0.153}$	$0.311 {}^{+0.174}_{-0.175}$
E_R [MeV]	$323.0^{+179.2}_{-181.1}$	$368.0^{+205.4}_{-207.1}$
Γ	$0.725^{+0.421}_{-0.418}$	$0.459 {}^{+0.267}_{-0.265}$
Γ [MeV]	$857.1_{-493.7}^{+497.1}$	$542.2^{+315.4}_{-313.7}$

Tabelle 6.6: Resonanzenergie und Halbwertsbreite des skalaren Iso-Singuletts $(ud-du)/\sqrt{2}$ für die Drehimpulsquantenzahl l = 2

Auch hier ist das Auftreten einer Resonanz anhand des Phasensprungs und des Peaks im Wirkungsquerschnitt ersichtlich.

Vergleicht man diese Ergebnisse mit dem Fall l = 1, so erkennt man, dass die Resonanzenergie höher liegt und gleichzeitig der Peak breiter ist. Dies entspricht den Erwartungen: Durch die höhere Drehimpulsquantenzahl ist das abstoßende Zentrifugalpotential stärker und der Zustand schwächer "gebunden" bzw. im Fall einer Resonanz weiter aus dem Potential "herausgeschoben". Aus der höheren Energie folgt, dass ein Durchtunneln der Potential-Barriere wahrscheinlicher wird, somit muss sich die Aufenthaltsdauer im inneren Bereich verringern. Ein entsprechendes Verhalten wird durch den zunehmenden Wert von Γ repräsentiert. Die graphische Verbreiterung des Peaks lässt sich ebenfalls in Abb. 6.3 und 6.4 unter Berücksichtigung der veränderten Energie-Skalierung auf der x-Achse erkennen.

Von Interesse ist nun, ob sich diese Abschwächung der Resonanz für höhere Drehimpulsquantenzahlen l fortsetzt. Eine entsprechende Analyse liefern für l = 3 und l = 4 die in Abb. 6.5 dargestellten Verläufe der Wirkungsquerschnitte. Man sieht eindeutig, dass die Halbwertsbreite zunimmt und gleichzeitig die Resonanzenergie steigt. Mit zunehmender Drehimpulsquantenzahl wird die Resonanz folglich schwächer. Neben dem graphischen Beleg unterstützen dies auch die im Anhang in Tabelle D.1 aufgeführten Resultate.

Unter physikalischen Gesichtspunkten bedeutet dies, dass die Lebensdauer des zur Resonanz gehörigen metastabilen Zustands immer geringer wird, wobei gleichzeitig die Masse aufgrund der zunehmenden Resonanzenergie ansteigt.



Abbildung 6.5: skalares Iso-Singulett $(ud - du)/\sqrt{2}$; Wirkungsquerschnitt $\sigma_l(E)$ für: links l = 3; rechts l = 4

Abschließend sollen der berechnete Gesamtfehler betrachtet und die physikalische Aussagekraft der Resultate untersucht werden. Für das skalare Iso-Singulett liegt der Fehler sowohl für die Resonanzenergie als auch für die Halbwertsbreite stets bei über 50% des ermittelten Wertes.

Aus diesem Grund können die berechneten Resultate keinesfalls als exakte Ergebnisse aufgefasst werden. Sie legen vielmehr einen Energiebereich fest, in dem die Resonanz existiert und bestimmen quantitativ deshalb die Größenordnung der auftretenden Resonanzenergie.

Dies schränkt jedoch in keiner Weise die qualitativen Aussagen ein: Zunächst bestätigen die Ergebnisse die Existenz von Resonanzen und damit metastabil gebundenen Tetraquark-Zuständen selbst unter Berücksichtigung des maximalen Fehlers. Weiterhin können die Resultate in Relation zu Zuständen mit anderen Konfigurationen gesetzt werden. Dieser Vergleich ermöglicht es, die stabilste Resonanz zu identifizieren und folglich den Tetraquark-Zustand mit der größten Lebensdauer zu bestimmen.

6.4.2 Vektorielles Iso-Triplett $uu, (ud + du)/\sqrt{2}, dd$

In diesem Abschnitt soll nun das vektorielle Iso-Triplett für die Quarkkonfiguration qq = ud betrachtet werden. Verwendet wird die Gitterkonstante a = 0.079 fm. Die Graphen basieren auf den Ergebnissen, welche mit den Parameter-Mittelwerten aus Tabelle 6.3 ermittelt wurden.

Dieser Fall ist von besonderem Interesse, weil im Gegensatz zum skalaren Iso-Singulett beim vektoriellen Iso-Triplett für ud kein Bindungszustand vorliegt. Ein entsprechender Tetraquark-Zustand kann für diese Quantenzahlen deshalb nur in Form einer Resonanz vorkommen.

Wie erwartet treten für l = 0 auch in diesem Fall keine Resonanzen auf, die entsprechenden graphischen Darstellungen sind im Anhang in Abb. C.2 gegeben.

Um Resonanzen zu entdecken, muss auch für diese Konfiguration zur Drehimpulsquantenzahl l = 1 übergegangen werden. Hierzu wird erneut das Energie-Intervall [10⁻³, 5] mit $d\hat{E} = 10^{-3}$ gewählt.

Die Auswertung der Daten liefert die in Abb. 6.6 dargestellte Energieabhängigkeit der Streuphase bzw. des Wirkungsquerschnitts.



Abbildung 6.6: vektorielles Iso-Triplett uu, $(ud + du)/\sqrt{2}$, dd für l = 1; links: Phasenverschiebung $\delta_l(E)$; rechts: Wirkungsquerschnitt $\sigma_l(E)$

Die auftretende Resonanz ist sowohl als Phasensprung als auch als Maximum des Wirkungsquerschnitts deutlich erkennbar. Zusätzlich lässt sich bereits graphisch ablesen, dass die Resonanz im Vergleich zum skalaren Fall (vergleiche Abb. 6.3) bei einer höheren Resonanzenergie liegt und gleichzeitig deutlich breiter ist. Entsprechend ist der zugehörige metastabile Zustand kurzlebiger.

Ein entsprechendes Resultat wird auch von den berechneten Zahlenwerten bestätigt, welche in Tabelle 6.7 zusammengestellt sind.

	ausgelesener Wert	gefitteter Wert
\hat{E}_R	$0.915^{+0.166}_{-0.391}$	$1.042^{+0.189}_{-0.445}$
E_R [MeV]	$1081.7^{+196.7}_{-462.4}$	$1231.9^{+222.9}_{-526.5}$
Γ	$2.640^{+0.467}_{-1.127}$	$1.824 {}^{+0.328}_{-0.785}$
$\Gamma [MeV]$	$3120.0^{+552.2}_{-1332.5}$	$2156.5^{+387.6}_{-927.2}$

Tabelle 6.7: Resonanzenergie und Halbwertsbreite des vektoriellen Iso-Tripletts uu, $(ud + du)/\sqrt{2}$, dd für die Drehimpulsquantenzahl l = 1

Für den Fall l = 2 wird das Energie-Intervall auf $[10^{-3}, 10]$ vergrößert. Eine Resonanz ist erkennbar, jedoch nicht so eindeutig ausgeprägt wie in den bisherigen Fällen, der Peak ist deutlich breiter (vergleiche Abb. C.3). Ebenso ist die Streuphase zwar durch einen Anstieg gekennzeichnet, man kann jedoch nicht von einem scharfen Sprung sprechen. Die Resonanz-Erscheinung ist somit nur sehr schwach ausgeprägt. Dieses Verhalten entspricht den Erwartungen bei zunehmender Drehimpulsquantenzahl. Eine weitere Erhöhung von l führt schließlich zu einem Verschwinden der Resonanz. Die zugehörigen Ergebnisse sind in Tabelle D.1 aufgeführt.

Wie bereits für das skalare Iso-Singulett ausführlich diskutiert, liefert der Breit-Wigner-Fit auch für diese Quark-Konfiguration keine präzise Übereinstimmung mit den ausgelesenen Werten. Es zeigt sich auch hier das bereits analysierte Verhalten einer größeren Resonanzenergie und einer kleineren Halbwertsbreite. Im Rahmen ihres jeweiligen Fehlers stimmen die Resultate jedoch auch in diesem Fall überein, sodass die qualitative Erkenntnis der Untersuchung durch beide Auswertungsverfahren erzielt wird.

6.4.3 Skalares Iso-Singulett $(s^{(1)}s^{(2)} - s^{(2)}s^{(1)})/\sqrt{2}$

Abschließend soll nun das skalare Iso-Singulett bestehend aus zwei hypothetischen Strange-Quarks $s^{(1)}$ und $s^{(2)}$ untersucht werden. Der skalare Iso-Singulett-Fall für zwei Strange-Quarks ist in der Natur aufgrund des Pauli-Prinzips nicht realisiert, sodass diese Betrachtung rein theoretischen Charakter besitzt.

Hierbei wird die Gitterkonstante a = 0.042 fm, die reduzierte Masse $m_{B_S,red} = \frac{1}{2} \cdot 6276$ MeV und das Energie-Intervall $[10^{-3}, 5]$ mit $d\hat{E} = 10^{-3}$ verwendet. Die Graphen basieren auf den Parametern aus Tabelle 6.3.

Analog zu den bisher untersuchten Konfigurationen treten im Fall l = 0 kein Phasensprung bzw. Maximum im Wirkungsquerschnitt auf, es existiert deshalb keine Resonanz. Die entsprechenden Graphen sind im Anhang in Abb. C.4 aufgeführt.

Für den Fall l = 1 sind die resultierenden Graphen in Abb. 6.7 dargestellt, die dazugehörigen Ergebnisse wurden in Tabelle 6.8 zusammengestellt. Die Resonanz ist in diesem Fall erneut sehr scharf und weist eine relativ kleine Halbwertsbreite auf. Gleichzeitig erkennt man für die gefitteten Ergebnisse die bereits diskutierten Abweichungen von den ausgelesenen Werten, welche auch hier im erwarteten Rahmen liegen.



Abbildung 6.7: Skalares Iso-Singulett $(s^{(1)}s^{(2)} - s^{(2)}s^{(1)})/\sqrt{2}$ für l = 1; links: Phasenverschiebung $\delta_l(E)$; rechts: Wirkungsquerschnitt $\sigma_l(E)$

	ausgelesener Wert	gefitteter Wert
\hat{E}_R	$0.114^{+0.131}_{-0.086}$	$0.129^{+0.149}_{-0.091}$
E_R [MeV]	$401.4^{+460.0}_{-301.8}$	$455.4^{+524.0}_{-321.3}$
Γ	$0.322 {}^{+0.383}_{-0.247}$	$0.219 {}^{+0.266}_{-0.174}$
Γ [MeV]	$1131.7^{+1346.7}_{-868.8}$	$770.4^{+935.9}_{-611.5}$

Tabelle 6.8: Resonanzenergie und Halbwertsbreite des skalares Iso-Singulett $(s^{(1)}s^{(2)} - s^{(2)}s^{(1)})/\sqrt{2}$ für die Drehimpulsquantenzahl l = 1

Auffallend ist hier jedoch der sehr große Fehler, der den Wert des Ergebnisses teilweise übersteigt. Zwar sind die unteren Fehlergrenzen etwas kleiner als das Ergebnis selbst und können somit nicht zu negativen Resonanzenergien führen. Dies würde Bindungszuständen entsprechen, was wiederum zu der in Abschnitt 6.3 durchgeführten Analyse im Widerspruch stehen und die vorliegenden Daten jeglicher physikalischer Aussagekraft berauben würde. Trotzdem besitzt ein Ergebnis mit einem Fehler, der 100% übersteigt, nur eine bedingte Aussagekraft. Wie aus Abb. 6.7 ersichtlich wird, existiert für die Parameter-Mittelwerte eindeutig eine Resonanz-Erscheinung. Die vorliegenden Daten der Potential-Parameter sind jedoch so großen Streuungen unterworfen, dass die Resonanzenergie ebenfalls sehr stark variiert. Um verlässlichere Aussagen über Resonanzenergie und Halbwertsbreite treffen zu können, müssten die Potential-Parameter über Gitter-Rechnungen genauer bestimmt werden.

Ein analoges Resultat tritt auch für den Fall l = 2 auf. Während für die Parameter-Mittelwerte eine Resonanz erkennbar ist, führt der große Fehler auch hier dazu, dass die Ergebnisse kaum verlässliche Informationen enthalten. Graphiken und berechnete Parameter sind im Anhang in Abb. C.5 bzw. Tabelle D.1 aufgeführt.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Die in dieser Arbeit vorgestellte Methodik ermöglicht es, über die Streuphase die Existenz von Resonanzen in dreidimensionalen sphärisch-symmetrischen Potentialen nachzuweisen. Beruhend auf quantenmechanischen Methoden kann mit Hilfe der Streutheorie der maximale Wirkungsquerschnitt bestimmt werden, welcher wiederum zur Identifikation der Lage einer Resonanz herangezogen werden kann. Am Beispiel eines modifizierten harmonischen Oszillators wurden Resonanzzustände diskutiert, welche sich dadurch auszeichnen, dass sie als quasi-gebundene Zustande mit einer positiven Energie auftreten. Es konnte gezeigt werden, dass ein Resonanzzuständ entsteht, wenn ein gebundener Zustand aus einem Potential "herausgeschoben" wird. Von besonderem Interesse bei dieser Untersuchung ist die Drehimpulsquantenzahl l. Die gewonnenen Daten bestätigen die bereits theoretisch begründete Erwartung, dass für ein drehimpulsfreies System (l = 0) keine Resonanzen auftreten.

Die so erzielten Erkenntnisse wurden im Folgenden auf ein System bestehend aus zwei statisch-schweren Anti-Bottom-Quarks $\bar{b}\bar{b}$ und zwei leichte Quarks ud übertragen. Dieses Tetraquark-System kann durch ein effektives Potential beschrieben werden, welches die schweren \bar{b} -Anti-Quarks gegenseitig erzeugen. Das Auftreten eines Bindungszustandes oder einer Resonanz für dieses $\bar{b}\bar{b}$ -Potential ist physikalisch gleichzusetzen mit der Existenz eines stabilen bzw. metastabilen Tetraquark-Zustands. Basierend auf Potential-Parametern, welche Rechnungen der Gitter-QCD entstammen, wurde ein gebundener Zustand für den sklaren Iso-Singulett-Fall mit einer Bindungsenergie von $-91.48^{+43.77}_{-43.69}$ MeV bestimmt. Ein entsprechender Bindungszustand konnte bereits durch Rechnungen auf dem Gitter nachgewiesen werden. Die qualitative Existenz des entsprechenden Zustandes ist somit hinreichend bestätigt. Für genauere quantitative Aussagen bezüglich der exakten Bindungsenergie müssen die zugrundeliegenden Potential-Parameter feiner bestimmt werden, sodass die Schwankungen um den Mittelwert der Potential-Parameter reduziert werden und sich der Fehler minimiert.

Der Fokus dieser Arbeit liegt jedoch auf der Untersuchung von Resonanzen für die drei verschiedenen $\bar{b}\bar{b}$ -Potentiale. Den Erwartungen entsprechend konnten für den drehimpulsfreien Fall keine Resonanzen nachgewiesen werden. Dies bestätigte die Annahme, dass für die Existenz einer Resonanz ein abstoßender Potential-Wall auftreten muss, sodass eine Resonanzerscheinung sich durch den Aufenthalt im inneren Bereich dieser Barriere auszeichnet.

Die Analyse höherer Quantenzahlen l basiert auf Datensätzen aus Gitter-QCD-Rechnungen, mit welchen die Potential-Parameter α und d in Tabelle 6.3 festlegt worden sind. Mit der analogen Vorgehensweise wurden die Mittelwerte für Resonanzenergie und Halbwertsbreite bestimmt. Diese Resultate konnten eindeutig das Auftreten von Resonanzen für die entsprechend gewählten Potentiale bestätigen.

Die niedrigste Resonanzmasse und gleichzeitig größte Lebensdauer weist der skalare Iso-Singulett Zustand für ud bei l = 1 auf. Der hypothetische und physikalisch nicht relevante Fall eines skalaren Iso-Singuletts mit $s^{(1)}s^{(2)}$ folgte mit einer höheren Resonanzenergie und geringeren Lebensdauer. Der physikalisch interessanteste Fall des vektoriellen Iso-Tripletts ud, der keinen Bindungszustand aufweist, zeigte die höchste Resonanzenergie und geringste Lebensdauer auf. Für alle drei Fälle kann die Abschwächung der Resonanz bei zunehmender Drehimpulsquantenzahl l bestätigt werden. Aufgrund der Tatsache, dass die zugrunde liegenden Potential-Parameter keinesfalls als exakt aufgefasst werden dürfen sondern fehlerbehaftet sind, überträgt sich deren Ungenauigkeit auch auf die Resultate für Resonanzenergie und Halbwertsbreite. Entsprechend wurden auf Grundlage der vorliegenden Daten sowohl der statistische als auch der systematische Fehler mit einbezogen und der Gesamtfehler bestimmt.

Der berechnete Fehler liegt für das skalare Iso-Singulett und das vektorielle Iso-Triplett des Systems $\overline{bb}ud$ im Bereich von ca. 50% bis 90% des Ergebnisses. Deswegen dürfen die Resultate nicht als quantitativ exakte Werte aufgefasst werden, sondern geben vielmehr das relevante Energie- bzw. Lebensdauer-Intervall an. Qualitativ ist jedoch eindeutig bestätigt, dass für das untersuchte Tetraquark-System Resonanz-Erscheinungen identifiziert werden können. Um den relevanten Energie-Bereich feiner einzugrenzen, ist es nötig, die Potential-Parameter über Gitter-Rechnungen genauer zu bestimmen. Lässt sich so das effektive Potential genauer beschreiben, reduziert sich auch der Fehler für Resonanzenergie und Halbwertsbreite.

Für das physikalisch nicht existierende sklare Iso-Singulett der Strange-Quarks liegt der Fehler bei etwa 100%. Eine qualitative Aussage ist deshalb nur bedingt möglich: Für die Parameter-Mittelwerte konnte eine Resonanz nachgewiesen werden, die sehr große Variation schränkt jedoch die tatsächliche Aussagekraft ein. Die Ursache dafür liegt auch in diesem Fall in der großen Streuung der Potential-Parameter-Werte. Diese sind für die vorliegende Konfiguration noch stärker fehlerbehaftet als für die leichten Quarks *ud*, was eine genauere Bestimmung der Resonanzenergie unmöglich macht.

Weiterhin ist es erstrebenswert, die in dieser Arbeit präsentierten Ergebnisse über eine alternative Herangehensweise zu bestätigen. Entsprechend sind Resonanzanalysen in Planung, welche direkt das Maximum der S-Matrix und somit der Streuamplitude bestimmen. Über die Berechnung der Pole in der komplexen Ebene können so Resonanzen identifiziert und Resonanzenergie sowie Halbwertsbreite extrahiert werden.

Diese Arbeit stellt einen Einstieg in die aufwendige Untersuchung von Resonanzen in Tetraquarks-Systemen dar. Schwerpunkt dieser Analyse war das Tetraquark-System $\bar{b}\bar{b}ud$, für das mit der vorliegenden Methode eindeutig Resonanzen nachgewiesen worden sind. Weitergehend wurde ein nicht realisiertes Tetraquark mit $\bar{b}\bar{b}s^{(1)}s^{(2)}$ analysiert, für das jedoch keine verlässlichen Aussagen getroffen werden konnten. Von Interesse ist für zukünftige Projekte die Betrachtung anderer möglicher Quark-Antiquark Konfigurationen und die Suche nach zugehörigen Resonanzen. Die dargelegten Resultate bilden eine Grundlage für weiterführende Untersuchungen und eine vertiefende Analyse metastabiler Tetraquark-Zustände.

Anhang

A Zusammenhang zu dimensionslosen Größen

Die in den theoretischen Grundlagen eingeführten Größen werden für die numerischen Berechnungen in dimensionslose Größen überführt. In der folgenden Auflistung ist der Zusammenhang der entsprechenden physikalischen einheitenbehafteten Größe zu ihrem dimensionslosen Pendant zusammengestellt. Die dimensionslosen Größen sind mit einem Dach (^) gekennzeichnet. Der entsprechende Parameter a dient der Überführung in dimensionslose Größen und besitzt die Einheit Länge. Der genaue Ausdruck für a ist abhängig vom vorliegenden Potential.

- $\hat{r} = \frac{r}{a}$
- $\hat{a}_G = \frac{a_G}{a}$
- $\hat{V}(\hat{r}) = \frac{2ma^2}{\hbar^2}V(r)$
- $\hat{E} = \frac{2ma^2}{\hbar^2}E$
- $\hat{k} = k \cdot a$
- $\hat{k}^2 = \hat{E}$
- $\hat{\alpha}_l = \alpha_l \cdot a$
- $\hat{\sigma}_l = \sigma_l/a^2$
- $\hat{\Gamma} = \frac{2ma^2}{\hbar^2}\Gamma$

B Ausführliche Herleitungen

B.1 Radialfunktion für große Abstände

Betrachtet man Gl. (3.11) für große Abstände r, so kann die Bessel-Funktion gemäß Gl. (3.9) entwickelt werden und die Eigenfunktion Ψ_k folgt zu:

$$\Psi_k(\mathbf{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{kr} P_l(\cos(\vartheta)) \left[\frac{i^l}{2i} \left(e^{i(kr - l\pi/2)} - e^{-i(kr - l\pi/2)} \right) + k f_l e^{ikr} \right]$$
(B.1)

Für die Radialfunktion wird die Form

$$R_{l}(r) = B_{l} \left[h_{l}^{*}(kr) + S_{l}(E) h_{l}(kr) \right]$$
(B.2)

angenommen, wobei der erste Teil eine einlaufende ebene Welle und der zweite Teil eine auslaufende Kugelwelle beschreibt. Verwendet man das asymptotische Verhalten der Hankel-Funktionen

$$h_l(r) \xrightarrow{r \to \infty} -i e^{i(kr - l\pi/2)} / kr$$
 (B.3)

$$h_l^*(r) \xrightarrow{r \to \infty} i \mathrm{e}^{-i(kr - l\pi/2)}/kr$$
 (B.4)

in Gl. (B.2), so ergibt sich:

$$R_l(r) = B_l \frac{1}{ikr} \left(-e^{-i(kr - l\pi/2)} + S_l(E) e^{i(kr - l\pi/2)} \right)$$
(B.5)

Die Radialfunktion von (B.1) ist gegeben durch

$$\frac{1}{2ikr} \left(-e^{-i(kr-l\pi/2)} + S_l(E) e^{i(kr-l\pi/2)} \right) + k f_l \frac{1}{i^l} e^{ikr}$$
(B.6)

Vergleich der einlaufenden Wellen in Gl. (B.5) und (B.6) liefert somit $B_l = \frac{1}{2}$.

Für $S_l(E)$ gilt aufgrund der Erhaltung der Wahrscheinlichkeitsdichte $|S_l(E)| = 1$, somit kann

$$S_l(E) = e^{2i\delta_l(E)} \tag{B.7}$$

gesetzt werden.

B.2 Streuamplitude

Setzt man Gl. (3.13) in (3.12), so ergibt sich die für große r geltende Gleichung

$$\Psi_k(\mathbf{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{i^l (2l+1)}{2ikr} \left(-e^{-i(kr-l\pi/2)} + e^{2i\delta_l(E)} e^{i(kr-l\pi/2)} \right) P_l(\cos(\vartheta))$$
(B.8)

Vergleicht man dies mit der Eigenfunktion in Gl. (B.1), so folgt, dass

$$\frac{i^{l}}{2i} e^{2i\delta_{l}(E)} e^{i(kr-l\pi/2)} \stackrel{!}{=} \frac{i^{l}}{2i} e^{i(kr-l\pi/2)} + k f_{l} e^{ikr}$$
(B.9)

Es lassen sich folgende Umformungen vornehmen:

$$\frac{i^l}{2i} \left(e^{i\pi/2} \right)^l e^{2i\delta_l(E)} \stackrel{!}{=} \frac{i^l}{2i} \left(e^{i\pi/2} \right)^l + k f_l \tag{B.10}$$

$$\frac{i^{l}}{2i}(-i)^{l} e^{2i\delta_{l}(E)} \stackrel{!}{=} \frac{i^{l}}{2i}(-i)^{l} + k f_{l}$$
(B.11)

$$\frac{\mathrm{e}^{2i\delta_l(E)}}{2i} \stackrel{!}{=} \frac{1}{2i} + k f_l \tag{B.12}$$

$$\Rightarrow f_l = \frac{\mathrm{e}^{2i\delta_l(E)} - 1}{2ik} = \frac{\mathrm{e}^{i\delta_l(E)} \cdot \sin(\delta_l)}{k} \tag{B.13}$$

B.3 Wirkungsquerschnitt

Für die Berechnung des Wirkungsquerschnitts setzt man in Gl. (3.6) die Streuamplitude aus Gl. (3.8) mit dem hergeleiteten Ausdruck für die Partialwellenamplituden aus Gl. (3.16) ein:

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l = \int d\Omega |f_k(\vartheta, \varphi)|^2$$

$$= \int d\Omega \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l(E) - \delta_{l'}(E))} \sin(\delta_l) \sin(\delta_{l'}) P_l(\cos(\vartheta)) P_{l'}(\cos(\vartheta))$$
(B.15)

Mit der Orthogonalitätsbedingung für die Legendre-Polynome

$$\int d\Omega P_l(\cos(\vartheta)) P_{l'}(\cos(\vartheta)) = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{ll'}$$
(B.16)

folgt somit:

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2(\delta_l)$$
(B.17)

B.4 Phasenverschiebung aus Stetigkeitsbedingung

Ausgangspunkt ist die Stetigkeitsbedingung

$$\frac{d}{dr}\ln\left(R_l^{<}(r)\right)\Big|_{r=a} \stackrel{!}{=} \frac{d}{dr}\ln\left(R_l^{>}(r)\right)\Big|_{r=a}$$
(B.18)

welche mit Gl. (3.13) und (3.18) zu

$$\alpha_l = \frac{\frac{d}{dr} \left(h_l^*(kr) + e^{2i\delta_l} h_l(kr) \right)}{h_l^*(kr) + e^{2i\delta_l} h_l(kr)} \bigg|_{r=a}$$
(B.19)

folgt.

Mit Gl. (3.14) und (3.15) kann dies umgeformt werden zu:

$$\alpha_l \left(j_l(kr) - i n_l(kr) + e^{2i\delta_l} \left[j_l(kr) + i n_l(kr) \right] \right) \Big|_{r=a}$$
(B.20)

$$= \frac{d}{dr}j_l(kr) - i\frac{d}{dr}n_l(kr) + e^{2i\delta_l} \left[\frac{d}{dr}j_l(kr) + i\frac{d}{dr}n_l(kr)\right]\Big|_{r=a}$$
(B.21)

Durch Ausklammern und mit der Abkürzung $\frac{d}{dr}j_l(kr) = j'_l(kr)$ ergibt sich hieraus:

$$\left(1 + e^{2i\delta_l}\right) \left[\alpha_l j_l(kr) - j'_l(kr)\right]\Big|_{r=a} = i \cdot \left(1 - e^{2i\delta_l}\right) \left[\alpha_l n_l(kr) - n'_l(kr)\right]\Big|_{r=a}$$
(B.22)

Dies ergibt schließlich:

$$\frac{n_l'(kr) - \alpha_l n_l(kr)}{j_l'(kr) - \alpha_l j_l(kr)} \bigg|_{r=a} = i \cdot \frac{\mathrm{e}^{2i\delta_l} + 1}{\mathrm{e}^{2i\delta_l} - 1} = i \cdot \frac{\mathrm{e}^{i\delta_l} + \mathrm{e}^{-i\delta_l}}{\mathrm{e}^{i\delta_l} - \mathrm{e}^{-i\delta_l}} = \frac{\mathrm{cos}(\delta_l)}{\mathrm{sin}(\delta_l)} = \mathrm{cot}(\delta_l) \tag{B.23}$$

C Resonanzdiagramme

C.1 Oszillator-Topf



Abbildung C.1: Wirkungsquerschnitt $\hat{\sigma}_l(\hat{E})$ für Oszillator-Topf mit $\hat{a}_G = 2.8$; links: l = 1; rechts: l = 3

C.2 $\overline{b}\overline{b}$ -Potential



Abbildung C.2: vektorielles Iso-Triplett uu, $(ud + du)/\sqrt{2}$, dd für l = 0; links: Phasenverschiebung $\delta_l(E)$; rechts: Wirkungsquerschnitt $\sigma_l(E)$



Abbildung C.3: vektorielles Iso-Triplett uu, $(ud + du)/\sqrt{2}$, dd für l = 2; links: Phasenverschiebung $\delta_l(E)$; rechts: Wirkungsquerschnitt $\sigma_l(E)$



Abbildung C.4: Skalares Iso-Singulett $(s^{(1)}s^{(2)} - s^{(2)}s^{(1)})/\sqrt{2}$ für l = 0; links: Phasenverschiebung $\delta_l(E)$; rechts: Wirkungsquerschnitt $\sigma_l(E)$



Abbildung C.5: Skalares Iso-Singulett $(s^{(1)}s^{(2)} - s^{(2)}s^{(1)})/\sqrt{2}$ für l = 2; links: Phasenverschiebung $\delta_l(E)$; rechts: Wirkungsquerschnitt $\sigma_l(E)$

D Zusammenstellung der Ergebnisse

Zustand (Drehimpuls)		ausgelesener Wert	gefitteter Wert
skalares Iso-Singulett $(l = 1)$			
$(ud-du)/\sqrt{2}$	\hat{E}_R	$0.0662^{+0.0587}_{-0.0538}$	$0.0744 {}^{+0.0608}_{-0.0547}$
	E_R [MeV]	$78.21^{+69.32}_{-63.54}$	$87.98^{+71.87}_{-64.66}$
	Γ	$0.165^{+0.161}_{-0.144}$	$0.114 {}^{+0.104}_{-0.091}$
	$\Gamma [MeV]$	$195.5^{+190.9}_{-169.8}$	$135.1^{+122.7}_{-107.5}$
skalares Iso-Singulett $(l = 2)$			
$(ud-du)/\sqrt{2}$	\hat{E}_R	$0.273^{+0.152}_{-0.153}$	$0.311^{+0.174}_{-0.175}$
	E_R [MeV]	$323.0^{+179.2}_{-181.1}$	$368.0^{+205.4}_{-207.1}$
	Γ	$0.725^{+0.421}_{-0.418}$	$0.459^{+0.267}_{-0.265}$
	$\Gamma [MeV]$	$857.1_{-493.7}^{+497.1}$	$542.2^{+315.4}_{-313.7}$
skalares Iso-Singulett $(l = 3)$			
$(ud-du)/\sqrt{2}$	\hat{E}_R	$0.576^{+0.266}_{-0.276}$	$0.662^{+0.306}_{-0.319}$
	E_R [MeV]	$680.5^{+313.9}_{-326.7}$	$782.6^{+361.8}_{-376.5}$
	Γ	$1.581^{+0.743}_{-0.770}$	$0.965^{+0.513}_{-0.527}$
	$\Gamma [MeV]$	$1868.2^{+878.3}_{-910.3}$	$1140.3^{+606.7}_{-622.7}$
skalares Iso-Singulett $(l = 4)$			
$(ud-du)/\sqrt{2}$	\hat{E}_R	$0.978 {}^{+0.439}_{-0.460}$	$1.128 {}^{+0.506}_{-0.531}$
	E_R [MeV]	$1156.1^{+519.1}_{-544.2}$	$1333.6^{+598.3}_{-627.5}$
	Γ	$2.717^{+1.223}_{-1.283}$	$1.647^{+0.757}_{-0.790}$
	$\Gamma [MeV]$	$3210.6^{+1445.9}_{-1515.8}$	$1946.4^{+894.6}_{-933.1}$
vektorielles Iso-Triplett $(l = 1)$			
$uu, (ud + du)/\sqrt{2}, dd$	\hat{E}_R	$0.915^{+0.166}_{-0.391}$	$1.042^{+0.189}_{-0.445}$
	\overline{E}_R [MeV]	$1081.7^{+196.7}_{-462.4}$	$1231.9^{+222.9}_{-526.5}$
	Γ	$2.640^{+0.467}_{-1.127}$	$1.824_{-0.785}^{+0.328}$
	Γ [MeV]	$3120.0^{+552.2}_{-1332.5}$	$2156.5^{+387.6}_{-927.2}$

vektorielles Iso-Triplett $(l = 2)$			
$uu, (ud + du)/\sqrt{2}, dd$	$\hat{E_R}$	$2.568^{+0.479}_{-1.040}$	$2.875^{+0.477}_{-1.204}$
	E_R [MeV]	$3035.3^{+566.3}_{-1229.4}$	$3397.4^{+563.7}_{-1422.4}$
	Γ	$6.857^{+1.128}_{-2.644}$	$4.647^{+0.882}_{-1.940}$
	Γ [MeV]	$8103.6^{+1333.5}_{-3125.3}$	$5492.2^{+1043.2}_{-2293.1}$
Skalares Iso-Singulett $(l = 1)$			
$(s^{(1)}s^{(2)} - s^{(2)}s^{(1)})/\sqrt{2}$	\hat{E}_R	$0.114^{+0.131}_{-0.086}$	$0.129^{+0.149}_{-0.091}$
	E_R [MeV]	$401.4^{+460.0}_{-301.8}$	$455.4^{+524.0}_{-321.3}$
	Γ	$0.322^{+0.383}_{-0.247}$	$0.219^{+0.266}_{-0.174}$
	Γ [MeV]	$1131.7^{+1346.7}_{-868.8}$	$770.4^{+935.9}_{-611.5}$
Skalares Iso-Singulett $(l = 2)$			
$(s^{(1)}s^{(2)} - s^{(2)}s^{(1)})/\sqrt{2}$	$\hat{E_R}$	$0.338 {}^{+0.354}_{-0.236}$	$0.387^{+0.406}_{-0.271}$
	E_R [MeV]	$1188.6^{+1243.8}_{-829.2}$	$1362.1_{-952.2}^{+1428.9}$
	Γ	$0.939 {}^{+0.999}_{-0.663}$	$0.595^{+0.639}_{-0.426}$
	Γ [MeV]	$3300.9^{+3512.5}_{-2333.5}$	$2093.4^{+2246.9}_{-1496.9}$

Tabelle D.1: Resonanzenergie und Halbwertsbreite der untersuchten Tetraquark-Zustände

E Literaturverzeichnis

- [1] Franz Schwabl: "Quantenmechanik (QM I), Eine Einführung", Springer Verlag, 7. Auflage (2007)
- [2] Pedro Bicudo, Krzysztof Cichy, Antje Peters, Björn Wagenbach, Marc Wagner: "Evidence for the existence of udbb and the non-existence of ssbb and ccbb tetraquarks from lattice QCD", arXiv:1505.00613v2 [hep-lat] 12 May 2015
- [3] Pedro Bicudo, Krzysztof Cichy, Antje Peters, Marc Wagner: "*B B interactions with static bottom quarks from Lattice QCD*", arXiv:1510.03441v1 [hep-lat] 12 Oct 2015
- [4] Wolfgang Nolting: "Grundkurs Theoretische Physik 5/2, Quantenmechanik Methoden und Anwendungen, Springer Verlag, 5. Auflage (2004)
- [5] Marc Wagner: "Numerische Methoden der Physik", Skript zur Vorlesung (SS 2014)
- [6] http://www.physics.utah.edu/ detar/phycs6730/handouts/jackknife/jackknife/
- [7] W.Franz: "*Quantentheorie*", Heidelberger Taschenbücher Band 102, Springer Verlag · Berlin · Heidelberg · New York 1971
- [8] Albert Messiah: "Quantenmechanik Band 1", Walter de Gruyter · Berlin · New York 1976
- [9] Donald H. Perkins: "Introduction to High Energy Physics", The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc., 2. Auflage (1982)
- [10] https://www.gnu.org/software/gsl/