Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Materie Coulomb-Potential und Forminvarianz in der supersymmetrischen Quantenmechanik

Jan Gesenhues (j.gesenhues@uni-muenster.de)

25. Januar 2012

Inhaltsverzeichnis

1	Ein	führung	2			
	1.1	Hamiltonoperator in der SUSY Quantenmechanik	2			
	1.2	Spontane Symmetriebrechnung	2			
	1.3	Beziehungen zwischen Eigenwerten und Eigenzuständen von H_1 und H_2	3			
	1.4	Vom Grundzustand zum Superpotential	4			
2	SUS	Y-Ketten, Forminvarianz und Coulomb Potential	5			
	2.1	Partnerpotential	5			
	2.2	SUSY Ketten	5			
	2.3	Forminvarianz	9			
	2.4	Höherdimensionale Systeme	11			
	2.5	Coulomb Potential	12			
\mathbf{Li}	Literaturverzeichnis					
A۱	Abbildungsverzeichnis					
Ta	Tabellenverzeichnis					

1 Einführung

1.1 Hamiltonoperator in der SUSY Quantenmechanik

Die Einführung supersymmetrischer Konzepte in die Quantenmechanik führt auf zwei wesentliche Aussagen. Zum einen ist dies die zweikomponentige Darstellung des Hamiltonoperators H_S und zum anderen die Darstellung der beiden Komponenten dieses Hamiltonoperators mit Hilfe der bosonischen Auf- bzw. Absteigeoperatoren B^{\pm} .

$$H_S = Q_1^2 = Q_2^2 = \begin{pmatrix} H_1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B^+ B^- & 0 \\ 0 & B^- B^+ \end{pmatrix} \quad , \tag{1}$$

mit den supersymmetrischen Operatoren Q_1 und Q_2 . Die Auf- bzw. Absteigeoperatoren lassen sich mit Hilfe des Superpotential W darstellen.

$$B^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(W(x) \mp \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{d}{dx} \right) \quad . \tag{2}$$

1.2 Spontane Symmetriebrechnung

Existiert ein Grundzustand bei E = 0 so spricht man von exakter Supersymmetrie, tritt hingen kein Grundzustand bei E = 0 auf so bezeichnet man die Supersymmetrie als gebrochen.

Diese Begriffswahl basiert auf dem Konzept der spontanen Symmetriebrechnung. Man spricht von spontaner Symmetriebrechung, wenn ein System im Grundzustand die Symmetrie nicht respektiert. Mathematisch gesehen betrachtet man den Hamiltonoperator H (hier der Einfachheit halber mit Grundzustand bei E = 0) eines Systems, das energetisch invariant unter einer Transformation G ([H, G] = 0) ist. Dann bezeichnet man die Symmetrie die G vermittelt als gebrochen, wenn der Grundzustand diese Symmetrie nicht aufweist, dass heißt unter Transformation mit G ist das System im Grundzustand nicht invariant und G annihiliert den Grundzustand nicht.

$$G|0\rangle \neq 0$$
 (Sym. gebrochen) (3)

$$G|0\rangle = 0$$
 (Sym. exakt) (4)

Wir können dieses Konzept nun auf unsere SUSY-Operatoren Q_i anwenden. Die SUSY ist demnach exakt, wenn für den Grundzustand gilt:

$$Q_1|0n_F\rangle = 0 \quad \text{oder} \quad Q_2|0n_F\rangle = 0 \quad . \tag{5}$$

Da $H_S|0n_F\rangle = Q_i^2|0n_F\rangle = 0$ liegt der Grundzustand hier bei E = 0. Die SUSY ist also exakt, genau dann, wenn der Grundzustand bei E = 0 liegt. Es gibt nur einen Grundzustand der entweder zu H_1 oder zu H_2 gehört. Gibt es keinen Grundzustand zu E = 0, liegt der Grundzustand bei E > 0, ist wie alle anderen Zustände auch zweifach entartet und die SUSY ist gebrochen.

1.3 Beziehungen zwischen Eigenwerten und Eigenzuständen von H_1 und H_2

Die beiden Komponenten von H_S , H_1 und H_2 beschreiben zwei verschiedene Systeme und stehen über die SUSY in Beziehung zueinander. Betrachten wir die stationäre Schrödinger-Gleichung respektive für H_1 und H_2 :

$$H_1 \Psi_n^{(1)} = E_n^{(1)} \Psi_n^{(1)} \quad . \tag{6}$$

$$H_2 \Psi_n^{(2)} = E_n^{(2)} \Psi_n^{(2)} \quad . \tag{7}$$

Da H_1 und H_2 sich als Produkt der beiden linearen, bosonischen Differtialoperatoren B^{\pm} schreiben lassen, finden sich folgende Eigenwertgleichungen:

$$H_2 B^- \Psi_n^{(1)} = B^- B^+ B^- \Psi_n^{(1)} = E_n^{(1)} B^- \Psi_n^{(1)} ,$$

$$H_1 B^+ \Psi_n^{(2)} = B^+ B^- B^+ \Psi_n^{(2)} = E_n^{(2)} B^+ \Psi_n^{(2)} .$$

Daraus folgt, dass $E_n^{(1)}$ auch Eigenwert zu H_2 mit Eigenzustand $B^-\Psi_n^{(1)}$ ist und $E_n^{(2)}$ Eigenwert zu H_1 mit Eigenzustand $B^+\Psi_n^{(2)}$ ist.

Die beiden Hamiltonoperatoren beschreiben also das gleiche Eigenwertspektrum, welches zweifach entartet ist. Wir müssen allerdings aufpassen ob es sich um exakte oder gebrochene SUSY handelt. Zunächst interessiert und die exakte Supersymmetrie. Wir legen zunächst o.B.d.A. fest:

Der Grundzustand soll bei exakter SUSY immer zu
$$H_1$$
 gehören. (8)

Das Eigenwertspektrum von H_2 erhält man dann bis auf den Grundzustand aus dem Eigenwertspektrum von $E_n^{(1)}$.

$$E_0^{(1)} = 0$$
 und $E_n^{(2)} = E_{n+1}^{(1)}$ (SUSY exakt) (9)

Die entarteten Eigenfunktionen lassen sich mit B^{\pm} ineinander überführen. Die Energie bleibt erhalten und nur der Grundzustand von H_1 ist nicht entartet, da B^- ihn annihiliert.

$$\Psi_n^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{E_{n+1}^{(1)}}} B^- \Psi_{n+1}^{(1)} \quad (\text{SUSY exakt}), \tag{10}$$

$$\Psi_{n+1}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{E_n^{(2)}}} B^+ \Psi_n^{(2)} \quad (\text{SUSY exakt}).$$
(11)

Die Gültigkeit dieser beiden Gleichungen und die Wahl der Vorfaktoren lässt sich leicht nachprüfen. Setzt man (10) und (11) ineinander ein erhält man (6) bzw. (7).

Im Fall der gebrochenen SUSY liegt der Grundzustand nicht bei E = 0 und alle Zustände sind

entartet. H_1 und H_2 besitzen ein identisches Eigenwertspektrum.

$$E_n^{(2)} = E_n^{(1)} > 0 \quad (\text{SUSY gebrochen}) \tag{12}$$

Die Eigenzustände lassen sich analog zu (10) und (11) ineinander überführen, wir müssen allerdings nicht den nicht entarteten Grundzustand berücksichtigen und erhalten:

$$\Psi_n^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{E_n^{(1)}}} B^- \Psi_n^{(1)} \quad (\text{SUSY gebrochen}), \tag{13}$$

$$\Psi_n^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{E_n^{(2)}}} B^+ \Psi_n^{(2)} \quad (\text{SUSY gebrochen}).$$
(14)

1.4 Vom Grundzustand zum Superpotential

Mit dem Superpotential lässt sich über die Schrödingergl. der Grundzustand berechnen. Nun wollen wir ausgehend vom Grundzustand das Superpotential konstruieren. Dazu betrachten wir ebenfalls die Schrödinger-Gleichung von H_1 im Grundzustand $\Psi_0 := \Psi_0^{(1)}$ bei exakter SUSY.

$$H_{1}\Psi_{0} = \left(-\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{d^{2}}{dx^{2}} + \frac{1}{2}W^{2} - \frac{\hbar}{2\sqrt{m}}\frac{dW}{dx}\right)\Psi_{0} = 0$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^{2}}{2m}\Psi_{0}'' + \left(\frac{1}{2}W^{2} - \frac{\hbar}{2\sqrt{m}}W'\right)\Psi_{0} = 0 \quad .$$

Bringen wir die Ausdrücke mit Ψ_0 auf eine Seite erhält man

$$\frac{\Psi_0''}{\Psi_0} = \left(\frac{\sqrt{m}}{\hbar}W\right)^2 - \left(\frac{\sqrt{m}}{\hbar}W\right)' \quad . \tag{15}$$

Um aus diesem Ausdruck W erhalten zu können nutzen wir einen kleinen Trick. Mit Hilfe der Produktregel erhält man folgenden Ausdruck:

$$\left(\frac{\Psi_0'}{\Psi_0}\right)' = \frac{\Psi_0''}{\Psi_0} - \left(\frac{\Psi_0'}{\Psi_0}\right)^2 \tag{16}$$

Ein Vergleich von (15) und (16) führt auf einen Ausdruck für W.

$$W = -\frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{\Psi_0'}{\Psi_0} = -\frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{d}{dx} \ln \Psi_0 \quad . \tag{17}$$

Zur Probe lässt sich das Potential V_1 einmal ausrechnen. Wie man sieht, führt es einen wieder auf die Schrödinger-Gleichung im Grundzustand.

$$V_{1} = \frac{1}{2} \left(W^{2} - \frac{\hbar}{\sqrt{m}} W' \right) = \frac{\hbar^{2}}{m} \left(\frac{\Psi'_{0}}{\Psi_{0}} \right)^{2} + \frac{\hbar^{2}}{m} \left(\frac{\Psi'_{0}}{\Psi_{0}} \right)' \stackrel{(16)}{=} \frac{\hbar}{2m} \frac{\Psi''_{0}}{\Psi_{0}}$$
$$\Rightarrow -\frac{\hbar}{2m} \Psi''_{0} + V_{1} \Psi_{0} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad H_{1} \Psi_{0} = 0 \quad .$$

Aus dem Grundzustand von H_1 lässt sich nun also das Superpotential konstruieren. Mit der Kenntnis von W lassen sich dann die Partnerpotentiale V_1 und V_2 angeben.

Beispiel Wählen wir die Gaußsche Glockenkurve der Gestalt

$$\Psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right) \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \quad . \tag{18}$$

Mit (17) erhält man $W = \sqrt{m\omega x}$. Dies ist das Superpotential des harmonischen Oszillator. In der Tat beschreibt (18) den Grundzustand des harmonischen Oszillator. Die beiden Partnerpotentiale erhalten die Form

$$V_1 = \frac{m\omega^2}{2}x^2 - \frac{\hbar\omega}{2}$$
 und $V_2 = \frac{m\omega^2}{2}x^2 + \frac{\hbar\omega}{2}$ (19)

2 SUSY-Ketten, Forminvarianz und Coulomb Potential

2.1 Partnerpotential

Kehren wir zunächst zu den beiden Komponenten des Hamiltonoperators H_S zurück und splitten ihn in einen kinetischen und einen potentiellen Anteil auf.

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) \quad \text{mit} \quad V_1 = \frac{1}{2}\left(W^2 - \frac{\hbar}{\sqrt{m}}\frac{dW}{dx}\right) \quad , \tag{20}$$

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_2(x) \quad \text{mit} \quad V_2 = \frac{1}{2}\left(W^2 + \frac{\hbar}{\sqrt{m}}\frac{dW}{dx}\right) \quad .$$
(21)

 V_1 und V_2 be zeichnet man als Partnerpotentiale. Ihre Differenz ist

$$V_2 - V_1 = \frac{\hbar}{\sqrt{m}} W' \quad . \tag{22}$$

2.2 SUSY Ketten

Wir können aus jedem Beliebigen Hamiltop
noperator H mit Grundzustand $E_0 \ge 0$ einen SUSY Hamilton
operator mit $H_1 = H - E_0$ mit Grundzustand bei E = 0 konstruieren.
 H_1 lässt sich nun mit Hilfe zweier linearen Differential
operatoren B^{\pm} Faktorisieren. Wir wählen die Bezeichnung
 B_1^{\pm} .

$$H_1 = B_1^+ B_1^- + E_0^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_1$$

wobei $E_0^{(1)} = 0$. Die Konstante $E_0^{(k)}$ beschreibt im Folgenden die Energiedifferenz benachbarter SUSY Systeme. Für das erste System liegt der Grundzustand per Definition bei null. Aus dem Grundzustand von H_1 lässt sich mit (17) das Superpotential W finden. Wir wählen die Bezeichnung W_1 . Für die Operatoren und das Potential erhält man:

$$B_1^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(W_1 \mp \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{d}{dx} \right) \quad \text{mit} \quad W_1 = -\frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{d}{dx} \ln \Psi_0^{(1)} \quad ,$$
$$V_1 = \frac{1}{2} \left(W_1^2 - \frac{\hbar}{\sqrt{m}} W_1' \right) + E_0^{(1)} \quad .$$

Bestimmen wir jetzt den SUSY Partner H_2 , indem wir die Reihenfolge der beiden Operatoren vertauschen. Der Grundzustand $\Psi_0^{(2)}$ liegt nach (9) bei $E_0^{(2)} = E_1^{(1)}$.

$$H_2 = B_1^- B_1^+ + E_0^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_2$$

 mit

$$V_2 = \frac{1}{2} \left(W_1^2 + \frac{\hbar}{\sqrt{m}} W_1' \right) + E_0^{(1)} = V_1 + \frac{\hbar}{\sqrt{m}} W_1' \stackrel{(17)}{=} V_1 - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \ln \Psi_0^{(1)}$$

Ausgehend von der Eigenwertgleichung $H_2\Psi_0^{(2)} = E_0^{(2)}\Psi_0^{(2)}$ können wir H_2 mittels neuer Differentialoperatoren B_2^{\pm} ausdrücken die die Eigenschaft $B_2^+B_2^-\Psi_0^{(2)} = 0$ erfüllen und somit das auffinden eines neuen Superpotentials W_2 ermöglichen.

$$H_2 = B_2^+ B_2^- + E_0^{(2)}$$

definiert den neuen Hamiltonoperator, dessen Grundzustand $\Psi_0^{(2)}$ bei $E_0^{(2)} = E_1^{(1)}$ liegt. Der erste Anregungszustand von H_1 entspricht also gerade energetisch dem Grundzustand von H_2 . Aus dem Grundzustand $\Psi_0^{(2)}$ folgt ein neues Superpotential und die B_2^{\pm} erhalten die Gestalt

$$B_2^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(W_2 \mp \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{d}{dx} \right) \quad \text{mit} \quad W_2 = -\frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{d}{dx} \ln \Psi_0^{(2)}$$

Die Darstellung von H_2 mit B_2 impliziert dann wieder einen SUSY Partner

$$H_3 = B_2^- B_2^+ + E_0^{(2)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_3 \quad ,$$

 mit

$$V_3 = \frac{1}{2} \left(W_2^2 + \frac{\hbar}{\sqrt{m}} W_2' \right) + E_0^{(2)} = V_2 - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \ln \Psi_0^{(2)} = V_1 - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \ln \left(\Psi_0^{(1)} \Psi_0^{(2)} \right)$$

Erneut lassen sich zwei neue Operatoren B_3^{\pm} mit $B_3^+ B_3^- \Psi_0^{(3)} = 0$ einführen. Der Hamiltonoperator erhält dann die Gestalt

$$H_3 = B_3^+ B_3^- + E_0^{(3)} \quad ,$$

mit Grundzustand $\Psi_0^{(3)}$ bei $E_0^{(3)} = E_1^{(2)} = E_2^{(1)}$. Die Faktorisierung führt dann wieder auf ein SUSY System H_4 etc.

Fassen wir zusammen. Es lässt sich also immer ein neuer Hamilton operator H_k bestimmen der das Spektrum von H_1 , bis auf die ersten k-1 Energieeigenwerte $E_0^{(1)}$ bis $E_0^{(k-1)}$, enthält. Dies ist möglich, solange es einen Grundzustand bzw. gebundenen Zustand $\Psi_0^{(k)}$ zu H_k gibt. Gehen wir davon aus, dass alle Grundzustände frei von Nullstellen sind, so lässt sich ein Superpotential W_k gemäß Kap. 1.4 bestimmen.

Schreiben wir die Gleichungen noch einmal allgemein, so ist der k-te SUSY Hamiltonoperator gegeben mit

$$H_k = B_k^+ B_k^- + E_0^{(k)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_k \quad \text{mit} \quad E_0^{(k)} = E_{k-1}^{(1)} \quad , \tag{23}$$

 mit

$$B_k^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(W_k \mp \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{d}{dx} \right) \quad \text{und} \quad W_k = -\frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{d}{dx} \ln \Psi_0^{(k)} \quad .$$
(24)

Das k-te Partnerpotential erhält die Form

$$V_k = V_1 - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \ln \left(\Psi_0^{(1)} \cdots \Psi_0^{(k-1)} \right) \quad .$$
 (25)

Für das Eigenwertspektrum erhält man

$$E_n^{(k)} = E_{n+1}^{(k-1)} = E_{n+2}^{(k-2)} = \dots = E_{n+k-1}^{(1)} \quad .$$
(26)

Ist also das Eigenwertspektrum eines Hamiltonoperators bekannt, so lässt sich das Spektrum einer ganzen Kette von Partnerhamiltonoperatoren angeben.

Kümmern wir uns nun um die Zustände. In Kap. 1.3 haben wir gesehen, wie sich die Zustände (bei exakter SUSY) mit Anwenden von B^{\pm} in einander Überführen lassen.

$$\begin{split} \Psi_n^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{E_{n+1}^{(1)}}} B^- \Psi_{n+1}^{(1)} \quad , \\ \Psi_{n+1}^{(1)} &= \frac{1}{\sqrt{E_n^{(2)}}} B^+ \Psi_n^{(2)} \quad . \end{split}$$

Diese beiden Eigenschaften lassen sich auf alle SUSY Systeme übertragen, die durch die B_k^{\pm} definiert sind. Um der neuen Notation gerecht zu werden müssen wir die Grundzustandsenergie $E_0^{(k)}$ des k-ten Hamiltonoperators in dem Wurzelterm berücksichtigen. Es folgt:

$$\Psi_n^{(k+1)} = \frac{1}{\sqrt{E_{n+1}^{(k)} - E_0^{(k)}}} B_k^- \Psi_{n+1}^{(k)} \quad , \tag{27}$$

$$\Psi_{n+1}^{(k)} = \frac{1}{\sqrt{E_n^{(k+1)} - E_0^{(k)}}} B_k^+ \Psi_n^{(k+1)} \quad .$$
(28)

Von der Richtigkeit dieser beiden Gleichungen lässt man sich wieder überzeugen, indem man sie in einander einsetzt. Mit Kenntnis der B_k^{\pm} lassen sich also alle Zustände der SUSY Kette konstruieren. Man erhält z.B. den Grundzustand des (k + 1)-ten Systems aus dem k-ten angeregten Zustand des ersten Systems mittels Anwendung der B_k^- .

$$\Psi_0^{(k+1)} = N_k B_k^- B_{k-1}^- \cdots B_2^- B_1^- \Psi_k^{(1)} \quad .$$
⁽²⁹⁾

Andersherum führt die Anwendung der B_k^+ auf den k-ten Zustand des ersten Systems aus dem Grundzustand des (k + 1)-ten Systems.

$$\Psi_k^{(1)} = N_k B_1^+ B_2^+ \cdots B_{k-1}^+ B_k^+ \Psi_0^{(k+1)} \quad , \tag{30}$$

mit dem Normierungsfaktor

$$N_k = \frac{1}{\sqrt{E_k^{(1)} - E_0^{(1)}}} \frac{1}{\sqrt{E_{k-1}^{(2)} - E_0^{(2)}}} \cdots \frac{1}{\sqrt{E_1^{(k)} - E_0^{(k-1)}}} \frac{1}{\sqrt{E_0^{(k+1)} - E_0^{(k)}}}$$

Beispiel Wählen wir den Grundzustand des harm. Oszillators aus (18) für alle k Elemente der SUSY Kette

$$\Psi_0^{(k)} = \Psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right) \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

In der SUSY Kette erhält man dann mit (25) das k-te Partnerpotential zu

$$V_k = V_1 - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \ln\left(\Psi_0^{(1)} \cdots \Psi_0^{(k-1)}\right) = V_1 - \frac{\hbar}{m} \frac{d^2}{dx^2} \ln\left(\Psi_0\right)^{k-1}$$
$$= V_1 - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \left(-(k-1)\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) = V_1 + (k-1)\hbar\omega \quad ,$$

wobei V_1 die Form aus (19) hat. Da die Grundzustandsenergie von H_1 bei null liegt und der Grundzustand für alle Systeme gleich ist, lässt sich sofort der Grundzustand des k-ten Systems ablesen. Es handelt sich um die Verschiebung im Partnerpotential. Für die Energieeigenwerte erhält man das bekannte Spektrum des SUSY Oszillator.

$$E_0^{(k)} = E_{k-1}^{(1)} = (k-1)\hbar\omega$$
 mit $k = 1, 2, ...$

Potentiale wie z.B. das des harm. bzw. SUSY Oszillator bezeichnet man als forminvariant, da sie ihre *x*-Abhängigkeit beim Übergang zwischen den Partnerpotentialen beibehalten. Wie wir gerade gesehen haben ist dies besonders nützlich, um das Eigenwertspektrum auf rein algebraischen Weg zu erlangen.

2.3 Forminvarianz

Versuchen wir jetzt den Begriff der Forminvarianz zu präzisieren. Aus (22) ist uns bekannt das für die beiden Partnerpotentiale V_1 und V_2 gilt:

$$V_2 = V_1 + \frac{\hbar}{\sqrt{m}} W_1'$$

Anstatt nun Bedinungen an W'_1 zu stellen, damit die x-Abhängigkeit von V_1 beim Übergang zum SUSY Partner erhalten bleibt, führen wir unabhängig von x einen Parameter a ein von dem V_1 abhängt. Dieser soll sich beim Übergang zum Partnerpotential mit einer Funktion f(a)transformieren. Dies erlaubt es, folgende Definition eines forminvarianten Potentials zu liefern:

$$V_2(x,a) = V_1(x, f(a)) + R(a)$$
(31)

Das Potential V_2 ist gleich dem Potential V_1 , dessen Parameter *a* übergeht in f(a) plus einer additiven Konstante R(a). In Anlehnung an die SUSY Ketten lässt sich dieses Transformationsverhalten auf *k* Partnerpotentiale verallgemeinern. Für V_3 erhalten wir zunächst

$$V_3(x,a) = V_2(x, f(a)) + R(a) = V_1(x, f^2(a)) + R(f(a)) + R(a)$$

Führt man die Transformation nu
nk-1mal durch erhält man das $k\mbox{-te}$ Potential der SUSY Kette zu

$$V_k(x,a) = V_1(x, f^{k-1}(a)) + \sum_{j=1}^{k-1} R(f^{j-1}(a)) \quad , \tag{32}$$

wobe
i $f^j(a)$ die j-fache Anwendung von fauf
 a bezeichnet. Betrachten wir das (k+1)-te
 Partnerpotential

$$V_{k+1}(x,a) = V_1(x,f^k(a)) + \sum_{j=1}^k R(f^{j-1}(a)) = V_2(x,f^{k-1}(a)) + \sum_{j=1}^{k-1} R(f^{j-1}(a)) \quad , \tag{33}$$

dann folgt daraus, dass V_k und V_{k+1} Partnerpotentiale sind, weil V_1 und V_2 Partnerpotentiale sind und zu beiden die selbe Konstante addiert wird. Die beiden Hamiltonoperatoren bezüglich V_{k+1} und V_k beschreiben also das gleiche Eigenwertspektrum, bis auf den Grundzustand von H_k der im Spektrum von H_{k+1} nicht auftaucht. Um diesen Grundzustand zu ermitteln werfen wir einen Blick auf die beiden Hamiltonoperatoren:

$$H_k(x,a) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_1(x, f^{k-1}(a)) + \sum_{j=1}^{k-1} R(f^{j-1}(a)) \quad , \tag{34}$$

$$H_{k+1}(x,a) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_1(x, f^k(a)) + \sum_{j=1}^{k} R(f^{j-1}(a)) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_2(x, f^{k-1}(a)) + \sum_{j=1}^{k-1} R(f^{j-1}(a)) \quad .$$
(35)

Der Grundzustand des k-ten Systems lässt sich sofort angeben. Es handelt sich um die in den beiden SUSY Hamiltonoperatoren auftretende additive Konstante.

$$E_0^{(k)} = \sum_{j=1}^{k-1} R(f^{j-1}(a)) \quad .$$
(36)

Das Eigenwertspektrum von H_1 ist dann mit (26) allein durch die Kenntnis von f und R bekannt.

$$E_n^{(1)} = \sum_{j=1}^n R(f^{j-1}(a)) \quad \text{mit} \quad E_0^{(1)} = 0 \quad .$$
(37)

Nun interessieren uns die Zustände dieser forminvarianten SUSY Kette. Dazu drücken wir zunächst die Forminvarianz mit Hilfe der Hamiltonoperatoren aus.

$$H_k(a) = H_1(f^{k-1}(a)) + \text{const.}$$
 (38)

Daraus folgt für die Zustände die nützliche Beziehung

$$\Psi_0^{(k)}(x,a) = \Psi_0^{(1)}(x, f^{k-1}(a)) \quad .$$
(39)

Mit (30) lassen sich die Zustände der SUSY Kette ineinander überführen. Berücksichtigt man zusätzlich noch (39) erhält man den k-ten Zustand des ersten Systems direkt aus dessen Grundzustand. Der Übersicht halber lassen wir die Kennzeichnung weg, dass es sich um das erste System handelt. Wir erhalten eine Verallgemeinerung des Aufsteigeoperator-Formalismus, wie er vom harm. Oszillator bekannt ist, mit den Aufsteigeoperatoren B_j^+ .

$$\Psi_k(x,a) = \frac{1}{\sqrt{E_k - E_0}} \cdots \frac{1}{\sqrt{E_k - E_{k-1}}} B_1^+ \cdots B_k^+ \Psi_0(x, f^k(a)) \quad .$$
(40)

Beispiel Betrachten wir als Beispiel das forminvariante Potential der Gestalt

$$V_2(x,\hbar\omega) = V_1(x,\hbar\omega) + \hbar\omega \quad , \tag{41}$$

mit $R(a) = f(a) = a = \hbar \omega$. Das Energieeigenwertspektrum beschreibt nach (37) den SUSY Oszillator mit dem Eigenwertspektrum von H_1 :

$$E_n^{(1)} = n\hbar\omega \quad . \tag{42}$$

Da alle Grundzustände der Hamiltonoperatoren in der SUSY Kette gleich sind, erhält man mit (18) auch für alle Superpotentiale die gleiche Form. Alle Aufsteigeoperatoren sind deshalb gleich und erhalten die Form $B_j^+ = \sqrt{\hbar\omega}b^+$. Dann erhält man den *n*-ten Zustand des Systems mit

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{E_n - E_0}} \cdots \frac{1}{\sqrt{E_n - E_{n-1}}} B_1^+ \cdots B_k^+ \Psi_0(x)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{n\hbar\omega}} \cdots \frac{1}{\sqrt{\hbar\omega}} (\hbar\omega)^{\left(\frac{n}{2}\right)} (b^+)^n \Psi_0(x)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{n!}} (b^+)^n \Psi_0(x) \quad .$$

Damit reduziert sich (40) auf die vom Bose-Oszillator bekannte Formel zur Bestimmung des *n*-ten Zustands. Diese spezielle Art der Forminvarianz ist also dem SUSY Oszillator gemein.

2.4 Höherdimensionale Systeme

Alle unsere bisherigen Ausführen zur SUSY fanden in nur einer Dimension statt. Um reale Probleme zu untersuchen, müssen wir jedoch meistens dreidimensionale Systeme betrachten. Im Fall von Systemen mit sphärischer Symmetrie lässt sich ein System in Kugelkoordinaten beschreiben und mit der Betrachtung des radialen Anteil reduziert man das dreidimensionale auf ein eindimensionales System. Die Ortswellenfunktion lässt sich mir Hilfe eines Produktansatzes schreiben als

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{r} R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad , \tag{43}$$

mit der radialen Quantenzahl n. $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ sind die so genannten Kugelflächenfunktionen. Sie beschreiben den Winkelanteil und erfüllen die Eigenwertgleichung

$$\vec{L}^2 Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \quad , \tag{44}$$

mit der (ganzzahligen) Drehimpulsquantenzahl l und dem Drehimpulsoperator

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right) \quad . \tag{45}$$

Für den Radialteil erhält man so die Schrödinger-Gleichung der Gestalt:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \underbrace{V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}}_{=:V_{\text{eff}}(r)}\right)R_{nl}(r) = E_{nl}R_{nl}(r) \quad , \tag{46}$$

mit dem effektiven Potential $V_{\text{eff}}(r)$.

2.5 Coulomb Potential

Zum Abschluss ist es nun unser Ziel das Eigenwertspektrum des Coulomb Potential mit den Mitteln der SUSY Quantenmachanik zu lösen. Das Potential hat die Form

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \quad , \tag{47}$$

mit der Elementarladung e. Das effektive Potential erhält somit die Form

$$V_{\rm eff}(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \quad . \tag{48}$$

Um unsere SUSY Methoden anwenden zu können interessieren wir uns zunächst für eine Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung im Grundzustand. Für $r \to \infty$ lässt sich der Potentialanteil vernachlässigen und man erhält $e^{-\alpha r}$ als Lösung. Da aber für $r \to 0$ die Gesamtwellenfunktion aus (43) mit nur diesem Ansatz divergieren würde, müssen wir dieses unphysikalische Verhalten im Ursprung kompensieren. Als Ansatz bietet sich dann an

$$R_{0l}(r) = Cr^{\gamma}e^{-\alpha r} \quad , \tag{49}$$

mit $\gamma \geq 1$ und $\alpha > 0$. Wir setzen diesen Ansatz nun in (46) ein.

$$\begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{e^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \end{pmatrix} Cr^{\gamma}e^{-\alpha r} = E_0Cr^{\gamma}e^{-\alpha r} \\ \Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}Ce^{-\alpha r}\left(\gamma(\gamma-1)r^{\gamma-2} + \gamma(-\alpha)r^{\gamma-1} + \gamma(-\alpha)r^{\gamma-1} + r^{\gamma}\alpha^2\right) + \\ \quad -e^2r^{\gamma-1}e^{-\alpha r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m}r^{\gamma-2}e^{-\alpha r} = E_0r^{\gamma}Ce^{-\alpha r} \\ \Rightarrow \quad -\gamma(\gamma-1)r^{\gamma-2} + 2\gamma\alpha r^{\gamma-1} + \alpha^2r^{\gamma} - \frac{2me^2}{\hbar^2}r^{\gamma-1} + l(l+1)r^{\gamma-2} = \frac{2mE_0}{\hbar^2}r^{\gamma} \quad .$$

Ein Koeffizientenvergleich führt auf die Parameter γ und α und auf die Grundzustandsenergie.

$$\gamma = l+1$$
 und $\alpha = \frac{me^2}{\gamma\hbar^2} = \frac{me^2}{(l+1)\hbar^2}$ (50)

$$E_0 = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m} = -\frac{me^4}{2\hbar^2 (l+1)} \quad .$$
 (51)

Aus dem Grundzustand lässt sich nun gemäß Kap. 1.4 zunächst das Superpotential für ein beliebiges, aber festes l bestimmen.

$$W(r,l) = \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \left(\alpha - \frac{\gamma}{r} \right) = \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \left(\frac{me^2}{(l+1)\hbar^2} - \frac{l+1}{r} \right) \quad . \tag{52}$$

Für die Partnerpotentiale erhält man gemäß Kap. 2.1 die Ausdrücke

$$V_1(r,l) = \frac{me^4}{2\hbar^2(l+1)^2} - \frac{e^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \quad , \tag{53}$$

$$V_2(r,l) = \frac{me^4}{2\hbar^2(l+1)^2} - \frac{e^2}{r} + \frac{(l+1)(l+2)\hbar^2}{2mr^2} \quad .$$
(54)

Diese beiden Partnerpotentiale sind forminvariant gemäß (31) denn das Restglied ergibt sich mit

$$R(l) = V_2(r,l) - V_1(r,l+1) = \frac{me^4}{2\hbar^2(l+1)^2} - \frac{me^4}{2\hbar^2(l+2)^2} = \frac{me^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{(l+1)^2} - \frac{1}{(l+2)^2}\right) = \text{const.} \quad ,(55)$$

mit a = l und f(a) = a + 1. Um das Energiespektrum der SUSY Kette direkt algebraisch angeben zu können verwenden wir die Methodik aus Kap. 2.3. Dazu bestimmen wir zunächst das *j*-te Restglied der forminvarianten SUSY Kette:

$$R(f^{j}(l)) = R(l+j) = V_{2}(r,l+j) - V_{1}(r,l+j+1) = \frac{me^{4}}{2\hbar^{2}} \left(\frac{1}{(l+j+1)^{2}} - \frac{1}{(l+j+2)^{2}}\right)$$
(56)

Wir summieren dann die Rest
glieder gemäß (37) auf und man erhält für das Energiespektrum den Ausdruck

$$E_n^{(1)} = \sum_{j=1}^n R(f^{j-1}(l)) = \sum_{j=0}^{n-1} R(l+j) = \frac{me^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{(l+1)^2} - \frac{1}{(l+2)^2} + \frac{1}{(l+2)^2} - \frac{1}{(l+3)^2} + \dots + \frac{1}{(l+n-1)^2} - \frac{1}{(l+n)^2} - \frac{1}{(l+n)^2} - \frac{1}{(l+n+1)^2} \right) \quad .$$

Alle Terme bis auf der erste und der letzte heben sich in dieser Teleskopsumme auf. Es folgt

$$E_n^{(1)} = \frac{me^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{(l+1)^2} - \frac{1}{(l+n+1)^2} \right) \quad .$$
(57)

Um nun das Spektrum des tatsächlichen Coulomb-Problem angeben zu können müssen wir noch die Grundzustandsenergie aus (51) beachten. Für das Energiespektrum erhält man nach Addition der Grundzustandsenergie schließlich

$$E_N := E_n^{(1)} + E_0 = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{(l+n+1)^2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{N^2} \quad .$$
(58)

mit der Hauptquantenzahl N = n + l + 1. Die Zustände mit (n - j, l + j) sind paarweise entartet, wobei j = 0, ..., n. Sie führen auf die selbe Energie. Die Drehimpulsquantenzahl l nimmt Werte an von 0, ..., l + n an, mit der radialen Quantenzahl n = 0, 1, 2, ... Dies ist die, vom (nichtrelativistischen) Wasserstoffatom bekannte, N-fache Entartung der Zustände mit l = 0, ..., N - 1. In Tabelle 1 sind die entarteten Zustände in Abhängigkeit der Hauptquantenzahl N dargestellt.

Radialwellenfunktionen R_{nl}	E_N
$B^+ \longrightarrow$	
$\leftarrow B^-$	
R_{00}	$E_1 = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{1}$
R_{01}, R_{10}	$E_2 = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{4}$
R_{02}, R_{11}, R_{20}	$E_3 = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{9}$
$R_{03}, R_{21}, R_{12}, R_{30}$	$E_4 = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{16}$
$R_{0,N-1}, R_{1,N-2}, R_{2,N-3}, \dots, R_{N-2,1}, R_{N-1,0}$	$E_N = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{N^2}$

Tabelle 1: Entartung der Radialwellenfunktionen anhand der Hauptquantenzahl N mit Richtung des Aufsteigeoperator B^+ und Absteigeoperator B^- .

Kümmern wir uns nun um die Zustände. Von der Wellenfunktion des Grundzustandes aus können wir weitere Zustände mit Hilfe des verallgemeinerten Operator-Formalismus aus Kap. 2.3 berechnen. Das Prinzip dieses Verfahrens wollen wir anhand der Zustände zu N = 2 verdeutlichen.

Der Grundzustand gehört zur Hauptquantenzahl N = 1, d.h. n = 0, l = 0. Unser Grundzustand ist gegeben durch

$$R_{00}(r) = Cre^{-\frac{me^2}{1\hbar^2}r} \quad . \tag{59}$$

Den ersten Zustand $R_{01}(r)$ zur Energie E_2 erhalten wir aus (49) mit l = 1. Hierbei nutzen wir (39) aus. Der Konstante Faktor C muss aus Dimensionsgründen wie r von l abhängen. Es folgt

$$R_{01}(r) = C^2 r^2 e^{-\frac{me^2}{2\hbar^2}r} \quad . \tag{60}$$

Aus (40) ist bekannt, dass sich die Zustände mit Hilfe der Aufsteigeoperatoren ineinander überführen lassen. Im Fall von N = 2 gibt es nur einen weiteren Zustand. Um der Literatur in den Lösungen für die Radialwellenfunktionen der Form halber gerecht zu werden, erhalten die Aufsteigeoperatoren an dieser Stelle ein zusätzliches negatives Vorzeichen. Solange man auch dem Absteigeoperator ein negatives Vorzeichen gibt, gilt immernoch $H = (-B^+) \cdot (-B^-) = B^+B^-$. Außerdem ist eh nur das Betragsquadrat der Wellenfunktion als wirkliche physikalische Größe interessant. Der Auf- bzw. Absteigeoperator in Abhängigkeit von l ergibt sich mit dieser Festlegung zu

$$B^{\pm}(r,l) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \left(W(r,l) \mp \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{\partial}{\partial r} \right) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \left(\frac{me^2}{(l+1)\hbar^2} - \frac{l+1}{r} \mp \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad . \tag{61}$$

Der zweite Zustand zu N = 2 ergibt sich so zu

$$R_{10}(r) = -\frac{1}{\sqrt{E_2 - E_1}} B^+(r, 0) R_{01}(r) = -\sqrt{\frac{4}{3}} \frac{\hbar^2}{me^2} \left(\frac{me^2}{\hbar^2} - \frac{1}{r} - \frac{\partial}{\partial r}\right) C^2 r^2 e^{-\frac{me^2}{2\hbar^2}r}$$
$$= -\sqrt{\frac{4}{3}} \frac{\hbar^2}{me^2} \left(\frac{me^2}{\hbar^2} r^2 - r + \frac{me^2}{2\hbar^2} r^2 - 2r\right) C^2 e^{-\frac{me^2}{2\hbar^2}r}$$
$$= 3\sqrt{\frac{4}{3}} \frac{\hbar^2}{me^2} \left(r - \frac{me^2}{2\hbar^2} r^2\right) C^2 e^{-\frac{me^2}{2\hbar^2}r} .$$
(62)

Dieses Verfahren kann bis zu einem beliebigen N angewandt werden, je nachdem wie viele gebundene Zustände das System besitzt. Wir brauchen nur für den Parameter l aus R_{0l} , l = N-1einzusetzen und erhalten die Wellenfunktion $R_{0,N-1}$ zu E_N . Dann können wir durch Anwenden von $B^+(r, N-2)$ bis $B^+(r, 0)$ alle weiteren entarteten Zustände zu E_N berechnen. Der nächste Zustand den man erhält ist dann z.B. $R_{1,N-2} \propto B^+(r, N-2)R_{0,N-1}$. Der Vollständigkeit halber sei an dieser Stelle noch angemerkt, dass der Absteigeoperator $B^-(r, l)$ in umgekehrter Richtung operiert. Für den Zustand $R_{N-1,0}$ läuft der Absteigeoperator von $B^-(r, 0)$ bis $B^-(r, N-2)$ womit man wieder bei $R_{0,N-1}$ landet. Wendet man dann $B^-(r, N-1)$ auf diesen Zustand an, so wird dieser annihiliert.

$$B^{-}(r, N-1)R_{0,N-1} = 0 \quad . \tag{63}$$

Die Ergebnisse der Lösung des Wasserstoff- bzw. Coulomb-Problems lassen sich so auf elegante Art und Weise reproduzieren. Ein explizites Auftreten der komplizierten Laguerre-Polynome, wie sie bei der Lösung der DGL (46) auftauchen, erübrigt sich aber.

Für die ersten drei Energieniveaus sind in Abb. 1 - 3 noch einmal alle entarteten Zustände qualitativ dargestellt. Es lässt sich gut erkennen, wie der Aufsteigeoperator Nullstellen in der Wellenfunktion erzeugt, während der Absteigeoperator jene vernichtet. Für eine interaktive Darstellung des vorangegangenen Sachverhalts im Rahmen des Wolfram Demonstrations Project möchte ich an dieser Stelle noch auf [Bli] verweisen. [KS97, Kap. 3] [Nol04, K. 6.2] [DKS88]



Abbildung 1: Qualitative Darstellung der radialen Grundzustandswellenfunktion R_{00} zu E_1 mit $e = \hbar = m = C = 1$.



Abbildung 2: Qualitative Darstellung der radialen Grundzustandswellenfunktionen R_{01} und R_{10} zu E_2 mit $e = \hbar = m = C = 1$.



Abbildung 3: Qualitative Darstellung der radialen Grundzustandswellenfunktionen R_{02} , R_{11} und R_{20} zu E_3 mit $e = \hbar = m = C = 1$.

Literatur

- [Bli] BLINDER, S. M.: Hydrogenic Radial Functions via Supersymmetry. http://demonstrations.wolfram.com/HydrogenicRadialFunctionsViaSupersymmetry/, zuletzt besucht am 2.1.2012.
- [DKS88] DUTT, Ranabir ; KHARE, Avinash ; SUKHATME, Uday P.: Supersymmetry, Shape Invariance and Exactly Solvable Potentials. In: Am.J.Phys. 56 (1988), S. 163–168. http://dx.doi.org/10.1119/1.15697. – DOI 10.1119/1.15697
- [KS97] KALKA, H.; SOFF, G.: Supersymmetrie. Stuttgart : Teubner, 1997
- [Nol04] NOLTING, Wolfgang: Quantenmechanik-Methoden und Anwendungen. Berlin Heidelberg New-York : Springer, 2004

Abbildungsverzeichnis

1	Qualitative Darstellung der radialen Grundzustandswellenfunktion R_{00} zu E_1 mit	
	$e = \hbar = m = C = 1. \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots $	16
2	Qualitative Darstellung der radialen Grundzustandswellenfunktionen R_{01} und	
	R_{10} zu E_2 mit $e = \hbar = m = C = 1. \dots $	16
3	Qualitative Darstellung der radialen Grundzustandswellenfunktionen R_{02}, R_{11}	
	und R_{20} zu E_3 mit $e = \hbar = m = C = 1$.	17

Tabellenverzeichnis

1	Entartung der Radialwellenfunktionen anhand der Hauptquantenzahl ${\cal N}$ mit Rich-					
	tung des Aufsteigeoperator B^+ und Absteigeoperator B^- .	14				