



Bachelorarbeit

Die δ -Entwicklung in der supersymmetrischen Quantenmechanik

Lasse Kiesow*

Erstgutachter: Prof. Dr. M. Klasen
Zweitgutachter: Prof. Dr. G. Münster
Bearbeitungszeitraum: 16.04.14 bis 09.07.14
eingereicht am: 07.07.14

*1_kies02@wwu.de

Inhaltsverzeichnis

I. Einleitung	1
II. Supersymmetrische Quantenmechanik	3
1. Bose-Fermi-Supersymmetrie	3
1.1. Das einfachste SUSY Modell	3
1.1.1. SUSY-Operatoren	5
1.1.2. Der SUSY-Oszillator	6
2. Nichtlineare Bose-Fermi-Supersymmetrie	9
2.1. Der supersymmetrische Hamiltonoperator H_S	9
2.1.1. Das Eigenwertspektrum von H_S	10
2.2. Das Superpotential und die Riccati-Gleichung	11
2.3. Der Grundzustand	11
2.4. Vom Grundzustand zum Superpotential	13
2.5. Exakte und gebrochene SUSY	13
3. Supersymmetrische Quantenmechanik	15
3.1. Der Hamiltonoperator und sein SUSY-Partner	15
3.2. Eigenwerte und -zustände der SUSY-Partner	15
3.3. SUSY-Ketten	16
III. Die δ-Entwicklung in der supersymmetrischen Quantenmechanik	19
4. Die δ -Entwicklung	19
4.1. Abschätzung der Grundzustandsenergie	19
4.2. Abschätzung der Energie des ersten angeregten Zustands	27
IV. Vergleich der δ-Entwicklung mit anderen störungstheoretischen Methoden	29
5. Ritz'sches Variationsverfahren	29
5.1. Abschätzung der Grundzustandsenergien anharmonischer Potentiale mit dem Ritz'schen Variationsverfahren	29
5.2. Abschätzung der Energien des ersten angeregten Zustands	31
6. Die lineare δ -Entwicklung und logarithmische Störungstheorie	33
6.1. Abschätzung der Grundzustandsenergien anharmonischer Potentiale mit der linearen δ -Entwicklung und logarithmischer Störungstheorie	34
V. Zusammenfassung	41

Teil I. Einleitung

Symmetrien haben sich zur Beschreibung der Gesetze, denen die Natur unterliegt, als sehr nützlich erwiesen. Sie ermöglichen eine (oftmals) einfache mathematische Formulierung eines physikalischen Problems, indem sie die Dynamik des Systems einschränken und so die Lösung der Bewegungsgleichung vereinfachen. H. Poincaré zeigte für die Mechanik und E. Noether für die Feldtheorie, dass ein fundamentaler Zusammenhang zwischen Symmetrien und physikalischen Erhaltungsgrößen besteht.

Durch die Supersymmetrie (SUSY) erhält der Symmetriebegriff eine Erweiterung. Die SUSY wurde erstmals im Jahr 1971 von Gel'fand und Likhtman [10], Ramond [17] und Neveu und Schwartz [16] entdeckt und verbindet die bis dato getrennten Welten von Bosonen und Fermionen. Bosonen sind Teilchen mit ganzzahligem Spin, sie übertragen die vier bekannten Kräfte und genügen der Bose-Einstein-Statistik. Fermionen sind Teilchen mit halbzahligem Spin, sie sind die Grundbausteine der uns umgebenden Materie und genügen der Fermi-Dirac-Statistik. Außerdem unterliegen sie dem Pauli-Prinzip, welches besagt, dass sich keine zwei Fermionen im selben Zustand befinden können. Für Bosonen gibt es kein solches Prinzip, so dass beliebig viele Bosonen einen Zustand besetzen können. Die SUSY sagt die Existenz der sog. SUSY-Teilchen voraus, d.h. zu jedem Teilchen aus dem Standardmodell gibt es ein Partner-Teilchen, welches der jeweils anderen Statistik genügt, sonst aber identisch ist (bis auf die Masse). Von diesen SUSY-Teilchen ist das leichteste – das Neutralino – ein möglicher Anwärter für die Dunkle Materie. Es sei jedoch erwähnt, dass keines dieser SUSY-Teilchen bisher nachgewiesen werden konnte. Dies legt die Vermutung nahe, dass die SUSY spontan gebrochen ist und die Massen der SUSY-Teilchen daher so groß sind, dass sie noch nicht erzeugt bzw. beobachtet werden konnten. Um die spontane Symmetriebrechung zu untersuchen, betrachtete Witten in [19] eine vereinfachte $(0+1)$ -dim Feldtheorie – die nichtrelativistische supersymmetrische Quantenmechanik (SUSY QM). Seitdem hat sich die SUSY QM zu einem eigenen Forschungsgebiet entwickelt. Es ist durchaus bemerkenswert, dass sich die Konzepte der SUSY erfolgreich auf die nichtrelativistische Quantenmechanik anwenden lassen, da der Spin in dieser keine Rolle spielt. Aus der SUSY QM folgt, dass jedes System ein Partnersystem besitzt und dass deren Spektren und Eigenfunktionen durch die SUSY miteinander verknüpft sind. Des Weiteren können mit Hilfe der SUSY alte Näherungsmethoden verbessert und sogar neue gefunden werden. Eine davon – die δ -Entwicklung – ist Thema dieser Bachelorarbeit.

Die Arbeit ist wie folgt gegliedert. In Teil II werden einige wichtige Konzepte der SUSY QM vorgestellt. Dazu gehören unter anderem die SUSY Operatoren, der supersymmetrische Hamiltonoperator, das Superpotential, die Riccati-Gleichung und die SUSY-Ketten. Dieser Teil beruht hauptsächlich auf [5, 8, 13].

In Teil III wird die δ -Entwicklung in der SUSY QM vorgestellt und auf die anharmonischen Potentiale $V(x) = x^{2n}$ mit $n = 2,3,4$ angewandt. Es werden die Grundzustandsenergien und die Energien des ersten angeregten Zustandes abgeschätzt. Für diesen Teil sind die Veröffentlichungen [2, 3, 6, 8, 9] relevant.

In Teil IV werden zwei andere störungstheoretische Methoden vorgestellt: Das Ritz'sche Variationsverfahren und die logarithmische Störungstheorie in Verbindung mit der linearen δ -Entwicklung. Das Ritz'sche Variationsverfahren ist aus der 'gewöhnlichen' Quantenmechanik bekannt und bietet – wie die δ -Entwicklung auch – eine Möglichkeit die Grundzustandsenergien anharmonischer Potentiale abzuschätzen. Mit SUSY-Methoden können außerdem die Energien angeregter Zustände abgeschätzt werden, wie in [7] gezeigt wurde. Die lineare δ -Entwicklung bietet in Verbindung mit der logarithmischen Störungstheorie ebenfalls eine Möglichkeit die Grundzustandsenergien anharmonischer Potentiale abzuschätzen, wie in [14] gezeigt wurde.

Teil V schließlich ist eine Zusammenfassung der erzielten Ergebnisse.

Teil II. Supersymmetrische Quantenmechanik

1. Bose-Fermi-Supersymmetrie

In diesem Kapitel werden die Grundlagen der supersymmetrischen Quantenmechanik erläutert, die in allen supersymmetrischen Modellen ihre Gültigkeit behalten. Die Supersymmetrie beschreibt in der Quantenmechanik mittels eines Operators Q Transformationen zwischen bosonischen und fermionischen Zuständen, d.h. es gilt

$$Q|\text{Boson}\rangle \propto |\text{Fermion}\rangle \quad \text{und} \quad Q|\text{Fermion}\rangle \propto |\text{Boson}\rangle. \quad (1.1)$$

Im Folgenden werden das einfachste SUSY Modell ohne Wechselwirkung und das interessantere nichtlineare SUSY Modell mit Wechselwirkung zwischen bosonischen und fermionischen Zuständen beschrieben. Die Quantenmechanik – insbesondere Kommutatoren, Antikommutatoren und diesbezügliche Rechenregeln – wird dabei als bekannt vorausgesetzt.

1.1. Das einfachste SUSY Modell

Das einfachste SUSY Modell beinhaltet Bosonen und Fermionen, die nicht miteinander wechselwirken. Zur Beschreibung bedient man sich des Formalismus der zweiten Quantisierung, der aus der Quantenmechanik bekannt ist und die Erzeugung und Vernichtung von Teilchen zulässt. Man führt wie beim quantenmechanischen harmonischen Oszillator Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ein, muss nun aber auf Grund der Supersymmetrie zwischen Bosonen und Fermionen unterscheiden.

Bosonen: Ein Zustand $|n_B\rangle$ wird in der Besetzungszahldarstellung durch die Anzahl n_B der Bosonen charakterisiert. Durch den Erzeugungsoperator b^\dagger wird diese gemäß

$$b^\dagger|n_B\rangle = \sqrt{n_B + 1}|n_B + 1\rangle \quad (1.2)$$

erhöht und durch den Vernichtungsoperator b gemäß

$$b|n_B\rangle = \sqrt{n_B}|n_B - 1\rangle \quad (1.3)$$

erniedrigt. Da aus dem Vakuum $|0\rangle$ kein Teilchen entfernt werden kann, gilt $b|0\rangle = 0$. Man definiert den Teilchenzahl- oder Besetzungszahloperator

$$N_B = b^\dagger b, \quad (1.4)$$

da dieser die Teilchenzahl n_B als Eigenwert besitzt:

$$N_B|n_B\rangle = b^\dagger b|n_B\rangle = b^\dagger \sqrt{n_B}|n_B - 1\rangle = n_B|n_B\rangle.$$

Der Besetzungszahloperator ist hermitesch, da $N_B^\dagger = (b^\dagger b)^\dagger = b^\dagger b = N_B$.

Eine weitere wichtige Größe ist der Kommutator $[b, b^\dagger]$, der angewandt auf den Zustand $|n_B\rangle$

$$[b, b^\dagger]|n_B\rangle = (bb^\dagger - b^\dagger b)|n_B\rangle = (n_B + 1 - n_B)|n_B\rangle = |n_B\rangle \quad (1.5)$$

liefert. Ein Bosonen-System ist somit vollständig definiert durch

$$[b, b^\dagger] = \mathbb{1}, \quad [b^\dagger, b^\dagger] = [b, b] = 0. \quad (1.6)$$

Es kann jeder beliebige Zustand erzeugt werden, indem man den Erzeugungsoperator b^\dagger wiederholt auf den Vakuumzustand $|0\rangle$ anwendet

$$\begin{aligned} |1\rangle &= b^\dagger |0\rangle \\ |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} b^\dagger |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} b^\dagger b^\dagger |0\rangle \\ &\vdots \\ |n_B\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n_B!}} (b^\dagger)^{n_B} |0\rangle. \end{aligned}$$

Fermionen: Analog zur Bosonenzahl wird die Fermionenzahl n_F durch die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren f^\dagger und f gemäß

$$f^\dagger |n_F\rangle = \sqrt{n_F + 1} |n_F + 1\rangle \quad \text{und} \quad f |n_F\rangle = \sqrt{n_F} |n_F - 1\rangle \quad (1.7)$$

erhöht bzw. erniedrigt. Der Teilchenzahloperator für die Fermionen N_F besitzt als Eigenwert die Fermionenzahl n_F , genügt also der Eigenwertgleichung $N_F |n_F\rangle = n_F |n_F\rangle$. Auch hier kann kein Teilchen aus dem Vakuum entfernt werden, d.h. es gilt $f |0\rangle = 0$. Der entscheidende Unterschied zu den Bosonen besteht nun darin, dass Fermionen dem Pauli-Prinzip unterliegen. Der Einteilchenzustandsraum kann demnach nur von den Zuständen $|n_F\rangle = |0\rangle$ und $|n_F\rangle = |1\rangle = f^\dagger |0\rangle$ aufgespannt werden. Den Zustand $|2\rangle$ oder höhere Zustände kann es nicht geben, woraus man die Bedingung

$$|2\rangle = f^\dagger |1\rangle = (f^\dagger)^2 |0\rangle \stackrel{!}{=} 0 \quad (1.8)$$

erhält. Für die Fermionen gibt es also insgesamt die Bedingungen

$$f^\dagger |0\rangle = |1\rangle, \quad f |1\rangle = |0\rangle, \quad f |0\rangle = f^\dagger |1\rangle = 0, \quad (1.9)$$

die es ermöglichen die Operatoren f und f^\dagger als 2×2 Matrizen mit den Elementen $\langle n_F | f^{(\dagger)} | n'_F \rangle$ darzustellen:

$$f^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad f = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.10)$$

Ein Fermionen-System ist somit vollständig definiert durch

$$\{f, f^\dagger\} = \mathbb{1}, \quad \{f, f\} = \{f^\dagger, f^\dagger\} = 0. \quad (1.11)$$

Die Bedingungen, dass f mit f und f^\dagger mit f^\dagger antivertauschen, können auch als

$$(f^\dagger)^2 = 0 \quad \text{und} \quad f^2 = 0 \quad (1.12)$$

geschrieben werden und werden als **Nilpotenz** bezeichnet. Die Nilpotenz wird beim Auffinden des supersymmetrischen Hamiltonoperators eine wichtige Rolle spielen.

1.1.1. SUSY-Operatoren

Wie oben gezeigt, kann n_F nur die Werte 0 und 1 annehmen, wohingegen es für n_B keine Begrenzung nach oben gibt. Der Zustandsraum des einfachsten SUSY-Modells wird daher von den Produktzuständen

$$|n_B\rangle|n_F\rangle \equiv |n_B, n_F\rangle \quad \text{mit} \quad n_B = 0, 1, 2, \dots, \infty \quad \text{und} \quad n_F = 0, 1 \quad (1.13)$$

aufgespannt. Zustände mit $n_F = 0$ bezeichnet man als bosonische Zustände $|\text{Boson}\rangle$ und Zustände mit $n_F = 1$ als fermionische Zustände $|\text{Fermion}\rangle$. Die einfachsten Operatoren, die solche Zustände ineinander überführen, sind gegeben durch

$$\begin{aligned} Q_+|n_B, n_F\rangle &\propto |n_B - 1, n_F + 1\rangle, \\ Q_-|n_B, n_F\rangle &\propto |n_B + 1, n_F - 1\rangle. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Es gilt damit

$$\begin{aligned} Q_-|\text{Boson}\rangle &= 0, & Q_+|\text{Fermion}\rangle &= 0, \\ Q_-|\text{Fermion}\rangle &= |\text{Boson}\rangle, & Q_+|\text{Boson}\rangle &= |\text{Fermion}\rangle, \end{aligned} \quad (1.15)$$

da Q_+ ein Fermion erzeugt und ein Boson vernichtet und Q_- das Gegenteil bewirkt. Um die Eigenschaften dieser Operatoren näher zu untersuchen, stellt man sie als Kombination der aus Gl. (1.2), (1.3) und (1.7) bekannten Erzeuger und Vernichter dar, wobei der naheliegende Ansatz

$$Q_+ = a \cdot b f^\dagger \quad \text{und} \quad Q_- = a \cdot b^\dagger f \quad (1.16)$$

lautet. Dabei ist a ein beliebiger Vorfaktor, der für beide Operatoren gleich sein muss. Die Nilpotenz aus Gl. (1.12) überträgt sich auf die Q_\pm , sodass

$$Q_+^2 = Q_-^2 = 0 \quad (1.17)$$

gilt. Diese Bedingung ermöglicht es, den supersymmetrischen Hamiltonoperator H_S zu bestimmen. Dieser muss nämlich wegen der Supersymmetrie mit Q_\pm vertauschen, da die Supersymmetrie besagt, die Energie eines Systems bleibe bei Transformationen, welche die Q_\pm vermitteln, erhalten. Wenn H_S und Q_\pm vertauschen, gilt natürlich

$$[H_S, Q_\pm] = 0, \quad (1.18)$$

was durch den einfachen Ansatz

$$H_S = \{Q_+, Q_-\} \quad (1.19)$$

erfüllt wird, denn

$$\begin{aligned} [H_S, Q_+] &= [Q_+ Q_- + Q_- Q_+, Q_+] = Q_+ Q_- Q_+ - Q_+^2 Q_- + Q_- Q_+^2 - Q_+ Q_- Q_+ = 0, \\ [H_S, Q_-] &= [Q_+ Q_- + Q_- Q_+, Q_-] = Q_+ Q_-^2 - Q_- Q_+ Q_- + Q_- Q_+ Q_- - Q_-^2 Q_+ = 0. \end{aligned}$$

Die Nilpotenz der Q_\pm führt also zur Erhaltung der Supersymmetrie.

Das einfachste SUSY-Modell ist durch die Gl. (1.16), (1.18) und (1.19) im Prinzip vollständig definiert, jedoch sind die Q_\pm nicht hermitesch. Es lassen sich daraus aber leicht die hermitesch Operatoren

$$Q_1 = Q_+ + Q_- \quad \text{und} \quad Q_2 = -i(Q_+ - Q_-) \quad (1.20)$$

konstruieren. Diese sind zwar selbst nicht mehr nilpotent, aber wegen der Nilpotenz von Q_\pm antivertauschen sie

$$\{Q_1, Q_2\} = 0. \quad (1.21)$$

Für Q_1 gilt nun

$$Q_1|n_B,0\rangle \propto |n_B-1,1\rangle \quad \text{und} \quad Q_1|n_B,1\rangle \propto |n_B-1,0\rangle, \quad (1.22)$$

was den zu Beginn angegebenen SUSY Transformationen (1.1) mit $Q = Q_1$ entspricht. Wendet man Q_1 zweimal hintereinander auf einen Zustand an, so erhält man wieder den ursprünglichen Zustand. Der supersymmetrische Hamiltonoperator lautet ausgedrückt durch diese Operatoren

$$H_S = Q_1^2 = Q_2^2, \quad (1.23)$$

weshalb auch die Forderung der Energieerhaltung

$$[H_S, Q_1] = [H_S, Q_2] = 0 \quad (1.24)$$

erfüllt ist.

Das einfachste SUSY-Modell lässt sich durch je zwei SUSY-Operatoren beschreiben, nämlich Q_+ und Q_- oder Q_1 und Q_2 , welche wiederum nach Gleichung (1.20) ineinander überführt werden können. Ihre Eigenschaften sind dennoch sehr unterschiedlich und in Abb. 1.1 zusammengefasst dargestellt.

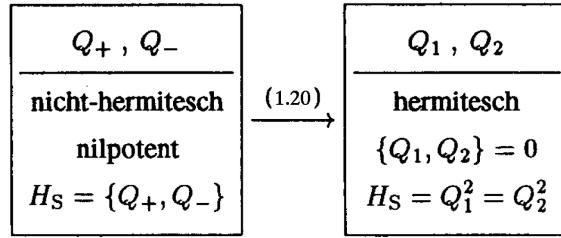


Abbildung 1.1. – Eigenschaften der SUSY-Operatoren Q_{\pm} und $Q_{1,2}$ [13].

Die Gleichungen (1.23) und (1.24) können auch geschrieben werden als

$$\begin{aligned} [H_S, Q_i] &= 0, \\ \{Q_i, Q_j\} &= 2H_S\delta_{ij} \end{aligned}$$

(1.25)

mit $i = 1,2$. Dies ist die einfachste SUSY-Algebra. Aus dieser Algebra folgen direkt zwei wichtige Eigenschaften des Eigenwertspektrums von H_S , die in Abs. 2.1.1 hergeleitet werden. Hier soll zunächst ein Beispiel – der SUSY-Oszillatator – betrachtet werden, dessen Eigenwertspektrum diese zwei Eigenschaften schon offenbart.

1.1.2. Der SUSY-Oszillatator

In diesem Abschnitt wird das Eigenwertspektrum des supersymmetrischen Hamiltonoperators $H_S = \{Q_+, Q_-\}$ ermittelt. Es wird sich zeigen, dass sich dieser als Summe der Hamiltonoperatoren eines Bose- und eines Fermi-Oszillators schreiben lässt, die deswegen nun erläutert werden.

Bose-Oszillatator: Zu einem Bose-Oszillatator gehört der Hamiltonoperator

$$H_B = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega_B^2}{2}Q^2, \quad (1.26)$$

wobei m die Masse, ω_B die Frequenz, P der Impuls- und Q der Ortsoperator ist. Ein Bose-Oszillator ist also der aus der Quantenmechanik bekannte harmonische Oszillator, bei dessen Behandlung es üblich ist, die Erzeuger b^\dagger bzw. Vernichter b mit

$$b^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega_B}{2\hbar}} \left(Q - \frac{iP}{m\omega_B} \right) \quad \text{und} \quad b = \sqrt{\frac{m\omega_B}{2\hbar}} \left(Q + \frac{iP}{m\omega_B} \right) \quad (1.27)$$

einzuführen. Mit Hilfe der Born-Jordan'schen Vertauschungsrelation $[Q, P] = i\hbar$ erhält man

$$[b, b^\dagger] = 1 \quad \text{und} \quad [b, b] = [b^\dagger, b^\dagger] = 0, \quad (1.28)$$

also exakt die Definition (1.6) eines Bosonen-Systems.

Durch Berechnung des Teilchenzahloperators

$$N_B = b^\dagger b = \frac{H_B}{\hbar\omega_B} - \frac{1}{2} \quad (1.29)$$

erhält man durch Umstellen

$$H_B = \hbar\omega_B \left(N_B + \frac{1}{2} \right). \quad (1.30)$$

Daraus folgt, dass H_B und N_B miteinander vertauschen und somit gleiche Eigenzustände besitzen. Die Energieniveaus E_{n_B} ergeben sich dann aus den beiden Eigenwertgleichungen $N_B|n_B\rangle = n_B|n_B\rangle$ und $H_B|n_B\rangle = E_{n_B}|n_B\rangle$ zu

$$E_{n_B} = \hbar\omega_B \left(n_B + \frac{1}{2} \right). \quad (1.31)$$

Fermi-Oszillator: Zu einem Fermi-Oszillator gehört der Hamiltonoperator

$$H_F = i\omega_F \psi \xi, \quad (1.32)$$

wobei ψ und ξ hermitesche Operatoren sind, für die die Antivertauschungsregeln

$$\{\psi, \xi\} = 0 \quad \text{und} \quad \{\psi, \psi\} = \{\xi, \xi\} = \hbar \quad (1.33)$$

gelten sollen. Auch hier führt man über

$$f = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\psi + i\xi) \quad \text{und} \quad f^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\psi - i\xi) \quad (1.34)$$

Erzeuger und Vernichter ein, die nun aber nicht die Vertauschungsregeln für Bosonen, sondern die Antivertauschungsregeln für Fermionen (1.11) erfüllen. Gleichung (1.34) kann nach ψ bzw. ξ umgestellt werden und liefert

$$\psi = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}(f^\dagger + f) \quad \text{und} \quad \xi = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}}(f^\dagger - f). \quad (1.35)$$

Eingesetzt in den Hamiltonoperator (1.32) liefert dies unter Ausnutzung von $\{f^\dagger, f\} = 1$ und $N_F = f^\dagger f$ wiederum

$$H_F = \hbar\omega_F \left(N_F - \frac{1}{2} \right). \quad (1.36)$$

Analog zum Bose-Oszillator folgen aus den Eigenwertgleichungen für H_F und N_F die Energieniveaus

$$E_{n_F} = \hbar\omega_F \left(n_F - \frac{1}{2} \right). \quad (1.37)$$

Der Fermi-Oszillator beschreibt ein Zwei-Zustandssystem, denn n_F kann nur die Werte 0 und 1 annehmen. Daraus folgt auch, dass die Nullpunktenergie $E_0 = -\frac{\hbar\omega_F}{2}$ negativ ist.

SUSY-Oszillator: Mit der Definition (1.16) von Q_{\pm} erhält man für den supersymmetrischen Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} H_S = \{Q_+, Q_-\} &= a^2 \{bf^\dagger, b^\dagger f\} = a^2(bf^\dagger b^\dagger f + b^\dagger f b f^\dagger) = a^2(\underbrace{bb^\dagger}_{1+b^\dagger b} f^\dagger f + b^\dagger b \underbrace{f f^\dagger}_{1-f^\dagger f}) \\ &= a^2(f^\dagger f + b^\dagger b f^\dagger f + b^\dagger b - b^\dagger b f^\dagger f) = a^2(b^\dagger b + f^\dagger f). \end{aligned} \quad (1.38)$$

Dabei wurde der Kommutator $[f^{(\dagger)}, b^{(\dagger)}] = 0$ genutzt, welcher gilt, da f und b auf unterschiedlichen Räumen wirken. Wählt man $a = \sqrt{\hbar\omega}$ mit $\omega = \omega_B = \omega_F$, sieht man, dass H_S die Summe der Hamiltonoperatoren eines Bose- und eines Fermi-Oszillators ist

$$H_S = \hbar\omega(b^\dagger b + f^\dagger f) = H_B + H_F. \quad (1.39)$$

Das Eigenwertspektrum ergibt sich damit aus $H_S|n_B, n_F\rangle = \hbar\omega(N_B + N_F)|n_B, n_F\rangle$ zu

$$E = \hbar\omega(n_B + n_F). \quad (1.40)$$

In Abb. 1.2 ist das Energiespektrum des SUSY-Oszillators dargestellt. Hieran sind zwei wichtige Eigenschaften zu erkennen:

Zum Einen ist das Energiespektrum nicht-negativ, der Grundzustand $|0,0\rangle$ liegt bei $E_0 = 0$ und ist nicht entartet. Die Tatsache, dass der Grundzustand bei $E = 0$ liegt, ist erfreulich, da Nullpunktsenergien in der Quantenfeldtheorie zu unerwünschten Divergenzen führen. Der Grundzustand spielt in der SUSY eine wichtige Rolle und wird in Abs. 2.3 näher behandelt.

Zum Anderen sind alle Zustände mit $E > 0$ zweifach entartet und die Partnerzustände $|n_B, 0\rangle$ und $|n_B - 1, 1\rangle$ besitzen die gleiche Energie:

$$E_{n_B, 0} = E_{n_B - 1, 1}. \quad (1.41)$$

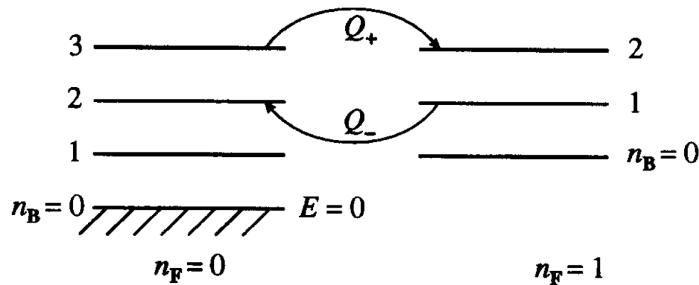


Abbildung 1.2. – Die niedrigsten Energieniveaus des SUSY-Oszillators [13].

2. Nichtlineare Bose-Fermi-Supersymmetrie

Die nichtlineare Bose-Fermi-Supersymmetrie beschreibt Systeme, bei denen es Wechselwirkungen zwischen den bosonischen und fermionischen Zuständen gibt. Die Supersymmetrie soll dabei selbstverständlich erhalten sein.

2.1. Der supersymmetrische Hamiltonoperator H_S

Grundlage der nichtlinearen Bose-Fermi-Supersymmetrie bildet die SUSY-Algebra (1.25). Anstelle der SUSY-Operatoren aus (1.16) werden im Folgenden allgemeinere SUSY-Operatoren Q_{\pm} betrachtet, die aber auch nilpotent sein müssen, da dies - wie im vorigen Kapitel gesehen - zur Erhaltung der Supersymmetrie führt. Wegen der Nilpotenz von f und f^{\dagger} sind auch die allgemeineren Operatoren

$$Q_+ = Bf^{\dagger} \quad \text{und} \quad Q_- = B^{\dagger}f, \quad (2.1)$$

nilpotent. Dabei sind $B^{(\dagger)} = B^{(\dagger)}(b, b^{\dagger})$ Funktionen der bosonischen Einteilchenoperatoren $b^{(\dagger)}$. Der supersymmetrische Hamiltonoperator H_S aus (1.19) lautet damit

$$H_S = BB^{\dagger}f^{\dagger}f + B^{\dagger}Bff^{\dagger}. \quad (2.2)$$

Dieser vertauscht zwar noch mit N_F , da

$$\begin{aligned} [H_S, N_F] &= [BB^{\dagger}f^{\dagger}f, f^{\dagger}f] + [B^{\dagger}Bff^{\dagger}, f^{\dagger}f] \\ &= BB^{\dagger} \underbrace{[f^{\dagger}f, f^{\dagger}f]}_{=0} + B^{\dagger}B \underbrace{[ff^{\dagger}, f^{\dagger}f]}_{=1-ff^{\dagger}} = 0, \end{aligned}$$

aber auf Grund der allgemeinen Struktur von B und B^{\dagger} nicht mit N_B

$$[H_S, N_B] = f^{\dagger}f[BB^{\dagger}, b^{\dagger}b] + ff^{\dagger}[B^{\dagger}B, b^{\dagger}b] \neq 0.$$

Die Energie E ist also nicht mehr durch n_B und n_F eindeutig festgelegt, weshalb die bisherige Bezeichnung der Zustände mit $|n_B, n_F\rangle$ durch $|E, n_F\rangle$ ersetzt wird. Die Eigenwertgleichungen für H_S und N_F lauten in dieser Notation dann

$$H_S|E, n_F\rangle = E|E, n_F\rangle \quad \text{und} \quad N_F|E, n_F\rangle = n_F|E, n_F\rangle. \quad (2.3)$$

Die Tatsache, dass n_F nur zwei Werte annehmen kann, legt eine zweikomponentige Darstellung - die sogennante **reine** oder **kanonische Darstellung** - der Art

$$|E, n_F\rangle = \begin{pmatrix} |E, 0\rangle \\ |E, 1\rangle \end{pmatrix} \iff \begin{cases} \text{Boson} \\ \text{Fermion} \end{cases} \quad (2.4)$$

nahe. Alle Operatoren sind in dieser Darstellung 2×2 Matrizen. Für die Q_1, Q_2 gilt nach (1.20) mit (1.10) und (2.1)

$$Q_1 = Q_+ + Q_- = Bf^{\dagger} + B^{\dagger}f = \begin{pmatrix} 0 & B^{\dagger} \\ B & 0 \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

$$Q_2 = -i(Q_+ - Q_-) = \begin{pmatrix} 0 & iB^{\dagger} \\ -iB & 0 \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

und für den supersymmetrischen Hamiltonoperator somit

$$H_S = Q_1^2 = Q_2^2 = \begin{pmatrix} B^\dagger B & 0 \\ 0 & BB^\dagger \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} H_- & 0 \\ 0 & H_+ \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

Man beachte, dass in dieser Darstellung die fermionischen Einteilchenoperatoren f und f^\dagger nicht mehr auftauchen und dass der supersymmetrische Hamiltonoperator H_S zwei Komponenten $H_- = B^\dagger B$ und $H_+ = BB^\dagger$ besitzt, die durch B und B^\dagger faktorisiert werden. Interessant ist, dass H_- und H_+ zwar unterschiedliche Quantensysteme beschreiben, sie – und das heißt ihre Eigenwerte und -funktionen – aber durch die Supersymmetrie in Beziehung zueinander gesetzt sind. Man nennt H_- und H_+ daher auch **SUSY-Partner**. Ihre Eigenwerte und -funktionen werden in Abs. 3.2 näher untersucht.

Da in der SUSY-Algebra (1.25) sowohl Kommutatoren als auch Antikommunitatoren vorkommen, ist es nützlich auch H_S mit diesen darzustellen:

$$H_S = \begin{pmatrix} B^\dagger B & 0 \\ 0 & BB^\dagger \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\{B, B^\dagger\}\mathbb{1} - \frac{1}{2}[B, B^\dagger]\sigma_3. \quad (2.8)$$

Dabei ist $\mathbb{1}$ die zweidimensionale Einheitsmatrix und $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ die dritte Pauli-Matrix.

2.1.1. Das Eigenwertspektrum von H_S

Das Eigenwertspektrum eines jeden SUSY-Hamiltonoperators zeichnet sich durch zwei Merkmale aus, welche die Betrachtung des SUSY-Oszillators bereits offenbarte:

1. Das Eigenwertspektrum ist nicht-negativ.
 2. Alle Zustände mit $E \neq 0$ sind zweifach entartet.

Diese Eigenschaften folgen direkt aus der SUSY-Algebra (1.25) und bleiben auch erhalten, wenn die Supersymmetrie gebrochen ist (siehe Abs. 2.5).

Die Nichtnegativität der Eigenwerte ist schnell gezeigt, denn Q_1 ist nach (1.20) hermitesch und besitzt somit reelle Eigenwerte. Da nun desweiteren der supersymmetrische Hamiltonoperator nach (1.23) als Quadrat von Q_1 geschrieben werden kann, besitzt er Eigenwerte, die nicht-negativ sind.

Um die zweifache Entartung zu zeigen, betrachte man einen Eigenvektor $|A\rangle$ von Q_1 , der wegen (1.23) auch Eigenvektor von H_S ist. Da $H_S|A\rangle = E|A\rangle$, gilt

$$Q_1|A\rangle = \sqrt{E}|A\rangle. \quad (2.9)$$

Hier soll nur der Fall $E > 0$ betrachtet werden (der Fall $E = 0$ wird in Abs. 2.3 gesondert behandelt). Wendet man nun Q_2 auf $|A\rangle$ an, erhält man einen neuen Zustand

$$|B\rangle \equiv Q_2|A\rangle. \quad (2.10)$$

Aus diesem erhält man nach erneuter Anwendung von Q_1

$$Q_1|B\rangle = Q_1Q_2|A\rangle \stackrel{(1.21)}{=} -Q_2Q_1|A\rangle = -\sqrt{E}Q_2|A\rangle = -\sqrt{E}|B\rangle \quad (2.11)$$

und sieht somit, dass auch $|B\rangle$ ein Eigenzustand von Q_1 ist. Nach (1.23) erhält man desweiteren

$$H_S|B\rangle = Q_1^2|B\rangle = E|B\rangle, \quad (2.12)$$

was bedeutet, dass auch $|B\rangle$ ein Eigenzustand von H_S ist, und zwar mit genau dem gleichen Eigenwert wie $|A\rangle$. Daher sind alle Zustände zweifach entartet, wenn $E > 0$ ist.

2.2. Das Superpotential und die Riccati-Gleichung

Ausgehend von den bosonischen Einteilchenoperatoren b und b^\dagger aus (1.27) können die Operatoren

$$B = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[W(Q) + \frac{iP}{\sqrt{m}} \right] \quad \text{und} \quad B^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[W(Q) - \frac{iP}{\sqrt{m}} \right] \quad (2.13)$$

eingeführt werden, indem man den Ortsoperator Q durch das **Superpotential** $W(Q)$ ¹ ersetzt. Durch diese Ersetzung erhält man ein i.A. nichtlineares SUSY-Modell. Eine Ersetzung des Impulsoperators ist physikalisch nicht sinnvoll, da sie zu einer Veränderung der kinetischen Energie führen würde. Es ist zu beachten, dass das Superpotential nicht als eine Art potentieller Energie angesehen werden darf, da seine Dimension [Energie]^{1/2} ist. Setzt man (2.13) in den supersymmetrischen Hamiltonoperator H_S aus (2.8) ein, erhält man mit

$$\begin{aligned} \{B, B^\dagger\} &= W^2 + \frac{P^2}{m}, \\ [B, B^\dagger] &= \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{dW}{dQ} \end{aligned}$$

den Grundstein der supersymmetrischen Quantenmechanik, nämlich

$$H_S = \begin{pmatrix} H_- & 0 \\ 0 & H_+ \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \left(\frac{P^2}{m} + W^2 \right) \mathbb{1} - \frac{1}{2} \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{dW}{dQ} \sigma_3. \quad (2.14)$$

Die Hamiltonoperatoren H_- und H_+ setzen sich aus einem kinetischen und einem potentiellen Anteil zusammen

$$H_\pm = \frac{P^2}{2m} + V_\pm(Q) \quad \text{mit} \quad V_\pm(Q) = \frac{1}{2} \left[W^2 \pm \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{dW}{dQ} \right], \quad (2.15)$$

wobei man $V_-(Q)$ und $V_+(Q)$ als **Partnerpotentiale** bezeichnet. Die rechte Seite von (2.15) lässt sich sofort umschreiben zur sog. **Riccati-Gleichung**

$$2V_\pm = W^2 \pm \frac{\hbar}{\sqrt{m}} W'. \quad (2.16)$$

Die Riccati-Gleichung spielt in der Supersymmetrie eine wichtige Rolle. In Abs. 4.1 ist ein Potential V_- gegeben und die Riccati-Gleichung wird störungstheoretisch gelöst, um die Grundzustandsenergie anharmonischer Potentiale abzuschätzen. In Abs. 6.1 sind hingegen Superpotentiale gegeben, aus denen man über die Riccati-Gleichung die Partnerpotentiale V_\pm bestimmen kann. Mit Hilfe der logarithmischen Störungstheorie können dann ebenfalls die Grundzustandsenergien anharmonischer Potentiale abgeschätzt werden und zusätzlich die Grundzustandsenergien der V_+ .

2.3. Der Grundzustand

Um den Grundzustand bei $E = 0$ zu untersuchen, betrachtet man die stationäre Schrödinger-Gleichung $H_S |0, n_F\rangle = 0$, welche wegen der Diagonaldarstellung von H_S aus (2.7) in die beiden einkomponentigen Gleichungen

$$H_- |0,0\rangle = B^\dagger B |0,0\rangle = 0 \quad (2.17)$$

$$H_+ |0,1\rangle = BB^\dagger |0,1\rangle = 0 \quad (2.18)$$

¹Häufig werden die Operatoren B, B^\dagger auch als $B = \tilde{W}(Q) + \frac{iP}{\sqrt{2m}}$ bzw. $B^\dagger = \tilde{W}(Q) - \frac{iP}{\sqrt{2m}}$ definiert. Dies ist besonders nützlich, wenn man $2m = 1$ setzt. Hier wird jedoch später mit $m = 1 (= \hbar)$ gerechnet und deshalb die Definition (2.13) verwendet.

zerfällt. (2.17) ist offensichtlich erfüllt, wenn $B|0,0\rangle = 0$, und (2.18), wenn $B^\dagger|0,1\rangle = 0$ gilt. Es gilt aber auch

$$H_-|0,0\rangle = 0 \Rightarrow B|0,0\rangle = 0 \quad \text{und} \quad H_+|0,1\rangle = 0 \Rightarrow B^\dagger|0,1\rangle = 0,$$

denn wenn man (2.17) mit $\langle 0,0|$ multipliziert, erhält man

$$0 = \langle 0,0|B^\dagger B|0,0\rangle = |B|0,0\rangle|^2$$

und aus (2.18) erhält man durch Multiplikation mit $\langle 0,1|$

$$0 = \langle 0,1|BB^\dagger|0,1\rangle = |B^\dagger|0,1\rangle|^2.$$

Statt der stationären Schrödinger-Gleichung, die eine Differentialgleichung 2. Ordnung ist, muss somit nur eine Differentialgleichung 1. Ordnung gelöst werden.

Um $B|0,0\rangle = 0$ und $B^\dagger|0,1\rangle = 0$ zu lösen, geht man in die Ortsdarstellung über

$$Q \rightarrow x, \quad P \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}, \quad W(Q) \rightarrow W(x) \quad (2.19)$$

und bezeichnet die bosonischen und fermionischen Wellenfunktionen bei $E = 0$ mit $\Psi_0^-(x) = \langle x|0,0\rangle$ und $\Psi_0^+(x) = \langle x|0,1\rangle$. Dann lauten die zu lösenden Gleichungen

$$\left(\frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{d}{dx} + W(x) \right) \Psi_0^-(x) = 0 \quad \text{und} \quad \left(\frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{d}{dx} - W(x) \right) \Psi_0^+(x) = 0, \quad (2.20)$$

deren Lösungen durch

$$\boxed{\Psi_0^\pm(x) = N \exp \left\{ \pm \frac{\sqrt{m}}{\hbar} \int_0^x W(y) dy \right\}} \quad (2.21)$$

gegeben sind. Eine Lösung für die Grundzustandswellenfunktion ist jedoch nur physikalisch sinnvoll, wenn sie normierbar ist. Anders ausgedrückt heißt das, die Grundzustandswellenfunktion muss quadratintegrierbar sein, d.h. sie muss für $|x| \rightarrow \infty$ hinreichend schnell verschwinden. Das ist genau dann der Fall, wenn das Argument der Exponentialfunktion gegen $-\infty$ strebt. Daraus folgt, dass $\Psi_0^-(x)$ Grundzustand zu $E = 0$ ist, wenn

$$\int_{-\infty}^0 W(y) dy = -\infty \quad \text{und} \quad \int_0^\infty W(y) dy = \infty \quad (2.22)$$

gilt, wohingegen $\Psi_0^+(x)$ Grundzustand zu $E = 0$ ist, wenn

$$\int_{-\infty}^0 W(y) dy = \infty \quad \text{und} \quad \int_0^\infty W(y) dy = -\infty \quad (2.23)$$

gilt. Da diese Bedingungen sich gegenseitig ausschließen, kann es nur *einen* Grundzustand bei $E = 0$ geben. Dieser ist entweder bosonisch oder fermionisch. In beiden Fällen spricht man von exakter Supersymmetrie. Per Definition soll der Grundzustand bei exakter SUSY zu H_- gehören. Dies lässt sich immer durch entsprechende Wahl des Vorzeichens von W erreichen.

Gebrochene Supersymmetrie liegt vor, wenn es keinen Zustand bei $E = 0$ gibt. Der Grundzustand liegt dann bei $E > 0$ und ist somit zweifach entartet. Exakte und gebrochen SUSY wird in Abs. 2.5 näher betrachtet.

Gleichung (2.21) besagt, dass bei exakter SUSY aus dem Superpotential W sofort die Grundzustandswellenfunktion Ψ_0^- zu H_- folgt. Es folgt aber auch aus der Grundzustandswellenfunktion Ψ_0^- sofort das Superpotential, wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird.

2.4. Vom Grundzustand zum Superpotential

Die stationäre Schrödinger-Gleichung $H_- \Psi_0^- = 0$ mit H_- aus (2.14) (in der Ortsdarstellung) liefert die in W nichtlineare Differentialgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_0^-}{dx^2} + \frac{1}{2} \left(W^2 - \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{dW}{dx} \right) \Psi_0^- = 0, \quad (2.24)$$

die umgeformt werden kann zu

$$\frac{\Psi_0^{--''}}{\Psi_0^-} = \left(\frac{\sqrt{m}}{\hbar} W \right)^2 - \left(\frac{\sqrt{m}}{\hbar} W \right)'. \quad (2.25)$$

Mit Hilfe von $\left(\frac{\Psi_0^{--'}}{\Psi_0^-} \right)' = \frac{\Psi_0^{--''}}{\Psi_0^-} - \left(\frac{\Psi_0^{--'}}{\Psi_0^-} \right)^2$ findet man *eine* Lösung für das Superpotential, nämlich

$$W = -\frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{\Psi_0^{--'}}{\Psi_0^-} = -\frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{d}{dx} \ln \Psi_0^-. \quad (2.26)$$

Damit ist schon gezeigt, dass sich das Superpotential aus der Grundzustandswellenfunktion Ψ_0^- von H_- herleiten lässt. Setzt man nun (2.26) in (2.15) ein, erhält man

$$V_- = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi_0^{--''}}{\Psi_0^-}. \quad (2.27)$$

Da Ψ_0^- die Grundzustandswellenfunktion ist, welche keine Nullstellen hat, sind W und V_- wohldefiniert.

2.5. Exakte und gebrochene SUSY

In Abs. 2.3 wurde gezeigt, dass es nur *einen* Zustand bei $E = 0$ geben kann, der entweder zu H_- oder zu H_+ gehört, wobei er hier per Definition immer zu H_- gehören soll. Die Supersymmetrie wurde in diesem Fall als exakt bezeichnet. Allgemein gilt

$$\text{SUSY exakt} \Leftrightarrow \text{Grundzustand bei } E = 0. \quad (2.28)$$

Ob die Supersymmetrie exakt ist, hängt davon ab, ob eine der Bedingungen (2.22) bzw. (2.23) erfüllt ist.

Die Bedingung (2.22) ist erfüllt, wenn

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} W(x) =: W_- < 0 \quad \text{und} \quad \lim_{x \rightarrow \infty} W(x) =: W_+ > 0 \quad (2.29)$$

gilt, (2.23) ist erfüllt, wenn

$$W_- > 0 \quad \text{und} \quad W_+ < 0 \quad (2.30)$$

gilt und die Supersymmetrie ist in beiden Fällen exakt. Gilt hingegen

$$W_\pm < 0 \quad \text{oder} \quad W_\pm > 0, \quad (2.31)$$

ist die Supersymmetrie gebrochen. Die Supersymmetrie ist also exakt, wenn das Superpotential unterschiedliche Vorzeichen für $x \rightarrow \infty$ und $x \rightarrow -\infty$ besitzt. Sie ist gebrochen, wenn das

Superpotential das gleiche Vorzeichen für $x \rightarrow \infty$ und $x \rightarrow -\infty$ besitzt.

Ist das Superpotential beispielsweise durch

$$W(x) = g \cdot x^n \quad (2.32)$$

gegeben, so ist die Supersymmetrie für ungerade n exakt und für gerade n gebrochen. Marques et al. führten in [14] das sog. ε -System ein, welches durch

$$W(x) = g \cdot \varepsilon(x) x^{2n}, \quad g > 0 \quad (2.33)$$

definiert ist, wobei $\varepsilon(x)$ die Signumfunktion ist. Sie führt dazu, dass die Supersymmetrie für alle n erhalten ist. Mit Hilfe des ε -Systems werden in Abs. 6.1 die Grundzustandsenergien der anharmonischen Potentiale $V(x) = x^{2n}$ mit $n = 2,3,4,5$ abgeschätzt.

3. Supersymmetrische Quantenmechanik

In diesem Kapitel wird die nichtrelativistische supersymmetrische Quantenmechanik behandelt. Diese beinhaltet neben der bekannten Quantenmechanik - also der stationären Schrödinger-Gleichung und der Born-Jordan Vertauschungsrelation

$$H\Psi = E\Psi \quad \text{mit} \quad H = \frac{P}{2m} + V(Q) \quad \text{und} \quad [Q, P] = i\hbar, \quad (3.1)$$

wobei im Folgenden ausschließlich die Ortsdarstellung (2.19) verwendet wird - auch die SUSY-Algebra. Im Folgenden wird die kanonische Darstellung (2.7) verwendet. Es treten daher nur die bosonischen Operatoren B und B^\dagger auf.

3.1. Der Hamiltonoperator und sein SUSY-Partner

Alle eindimensionalen Quantensysteme besitzen einen supersymmetrischen Partner, wie man leicht zeigen kann. Dazu betrachte man einen beliebigen Hamiltonoperator H . Durch Subtraktion der Grundzustandsenergie E_0 erhält man $H_- = H - E_0$, dessen Grundzustand dann wie gewünscht bei $E = 0$ liegt. Die Grundzustandswellenfunktion von H und H_- sei Ψ_0^- . Aus ihr erhält man nach (2.26) das Superpotential, aus welchem man mit der Riccati-Gleichung (2.16) das Partnerpotential V_+ und somit H_+ berechnen kann.

Da H_+ selbst mit einem weiterem Superpartner verbunden ist, welcher wiederum einen weiteren Superpartner besitzt usw., findet man eine ganze Kette von Hamiltonoperatoren, die über die SUSY miteinander verknüpft sind.

3.2. Eigenwerte und -zustände der SUSY-Partner

Die Komponenten H_- und H_+ des supersymmetrischen Hamiltonoperators H_S aus (2.14) definieren zwei Systeme

$$\text{System 1:} \quad H_-\Psi_n^- = E_n^-\Psi_n^- \quad (3.2)$$

$$\text{System 2:} \quad H_+\Psi_n^+ = E_n^+\Psi_n^+, \quad (3.3)$$

wobei n die Knotenzahl bezeichnet. Die Energieeigenwerte und -eigenfunktionen dieser beiden Systeme sind miteinander verbunden. Im Folgenden werden nur die gebundenen Zustände betrachtet. Dabei muss zwischen exakter und gebrochener SUSY unterschieden werden.

Exakte SUSY: Liegt exakte Supersymmetrie vor, so ist E_n^- (bzw. E_n^+) auch Eigenwert von H_+ (bzw. H_-), denn

$$H_+(B\Psi_n^-) = B \underbrace{B^\dagger B}_{=H_-} \Psi_n^- = E_n^-(B\Psi_n^-) \quad (3.4)$$

$$H_-(B^\dagger\Psi_n^+) = B^\dagger \underbrace{B B^\dagger}_{=H_+} \Psi_n^+ = E_n^+(B^\dagger\Psi_n^+). \quad (3.5)$$

Die beiden Systeme besitzen demzufolge gleiche Energiedifferenzen. Nur der Grundzustand von H_- bei $E = 0$ bildet eine Ausnahme. Die Beziehung zwischen den Energiedifferenzen lässt sich mit $n = 0, 1, 2, \dots$ schreiben als

$$E_0^- = 0 \quad \text{und} \quad E_n^+ = E_{n+1}^-. \quad (3.6)$$

Außerdem geht aus den Gleichungen (3.4) und (3.5) hervor, dass $B\Psi_n^-$ (bzw. $B^\dagger\Psi_n^+$) Eigenzustände von H_+ (bzw. H_-) sind. Die Wellenfunktionen bei gleicher Energie lauten damit

$$\Psi_n^+ = \frac{1}{\sqrt{E_{n+1}^-}} B\Psi_{n+1}^- \quad \text{bzw.} \quad \Psi_{n+1}^- = \frac{1}{\sqrt{E_n^+}} B^\dagger\Psi_n^+. \quad (3.7)$$

Die Operatoren B bzw. B^\dagger überführen also die Eigenfunktionen von H_- bzw. H_+ in die Eigenfunktionen von H_+ bzw. H_- bei gleicher Energie, indem sie Knoten in der Wellenfunktion vernichten bzw. erzeugen.

Gebrochene SUSY: Da bei gebrochener SUSY weder H_- noch H_+ einen Grundzustand bei $E = 0$ besitzen, sind ihre Energiedifferenzen für alle $n = 0, 1, 2, \dots$ äquivalent

$$E_n^- = E_n^+ > 0. \quad (3.8)$$

Die Wellenfunktionen bei gleicher Energie lauten damit

$$\Psi_n^+ = \frac{1}{\sqrt{E_n^-}} B\Psi_n^- \quad \text{bzw.} \quad \Psi_n^- = \frac{1}{\sqrt{E_n^+}} B^\dagger\Psi_n^+. \quad (3.9)$$

Die Operatoren B bzw. B^\dagger vernichten bzw. erzeugen hier also keine Knoten.

3.3. SUSY-Ketten

Um zu sehen, dass neben H_- und H_+ noch weitere Hamiltonoperatoren durch die SUSY miteinander verknüpft sind, bieten sich die Bezeichnungen

$$H_- = H_1, \quad V_- = V_1, \quad \Psi_0^- = \Psi_0^{(1)}, \quad (3.10)$$

$$H_+ = H_2, \quad V_+ = V_2, \quad \Psi_0^+ = \Psi_0^{(2)} \quad (3.11)$$

an. Des Weiteren seien die Operatoren, die H_1 faktorisieren nun mit

$$B_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(W_1 + \frac{\hbar}{2m} \frac{d}{dx} \right) \quad \text{und} \quad B_1^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(W_1 - \frac{\hbar}{2m} \frac{d}{dx} \right) \quad (3.12)$$

bezeichnet, wobei

$$W_1 = -\frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{d}{dx} \ln \Psi_0^{(1)} \quad \text{und} \quad V_1 = \frac{1}{2} \left(W_1^2 - \frac{\hbar^2}{\sqrt{m}} W_1' \right). \quad (3.13)$$

H_1 ist also gegeben durch

$$H_1 = B_1^\dagger B_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_1. \quad (3.14)$$

Für den SUSY-Partner H_2 gilt dann

$$H_2 = B_1 B_1^\dagger = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_2, \quad (3.15)$$

wobei das Partnerpotential V_2 gegeben ist durch

$$V_2 = \frac{1}{2} \left(W_1^2 + \frac{\hbar}{\sqrt{m}} W_1' \right) = V_1 + \frac{\hbar}{\sqrt{m}} W_1' = V_1 - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \ln \Psi_0^{(1)}. \quad (3.16)$$

Andererseits ist aus dem vorigen Abschnitt bekannt, dass die Grundzustandsenergie $E_0^{(2)}$ von H_2 gleich der Energie $E_1^{(1)}$ des ersten angeregten Zustands von H_1 ist. Daher kann H_2 auch geschrieben werden als

$$H_2 = B_2^\dagger B_2 + E_1^{(1)} \quad (3.17)$$

$$\text{mit } B_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(W_2 + \frac{\hbar}{2m} \frac{d}{dx} \right), \quad B_2^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(W_2 - \frac{\hbar}{2m} \frac{d}{dx} \right) \quad (3.18)$$

$$\text{und } W_2 = -\frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{d}{dx} \ln \Psi_0^{(2)}. \quad (3.19)$$

Damit ergibt sich der Superpartner H_3 von H_2 zu

$$H_3 = B_2 B_2^\dagger + E_1^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_3. \quad (3.20)$$

Das neue Partnerpotential V_3 ist gegeben durch

$$V_3 = \frac{1}{2} \left(W_2^2 + \frac{\hbar}{\sqrt{m}} W_2' \right) + E_1^{(1)} = V_2 - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \ln \Psi_0^{(2)} = V_1 - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \ln (\Psi_0^{(1)} \Psi_0^{(2)}) \quad (3.21)$$

und die Eigenwerte und -funktionen ergeben sich analog zum letzten Abschnitt zu

$$E_n^{(3)} = E_{n+1}^{(2)} = E_{n+2}^{(1)} \quad (3.22)$$

$$\Psi_n^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{E_{n+1}^{(2)} - E_0^{(2)}}} B_2 \Psi_{n+1}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{(E_{n+2}^{(1)} - E_1^{(1)}) \cdot (E_{n+2}^{(1)} - E_0^{(1)})}} B_2 B_1 \Psi_{n+2}^{(1)}. \quad (3.23)$$

Besitzt H_1 insgesamt p gebundene Zustände, kann auf diese Art und Weise eine Kette von $(p-1)$ Hamiltonoperatoren konstruiert werden, wie z.B. in [13] gezeigt ist. Hier wird auf die weitere Herleitung verzichtet und nur das Endergebnis angegeben:

$$E_n^{(s)} = E_{n+1}^{(s-1)} = \cdots = E_{n+s-1}^{(1)}, \quad (3.24)$$

$$\Psi_n^{(s)} = \frac{1}{\sqrt{(E_{n+s-1}^{(1)} - E_{s-2}^{(1)}) \cdots (E_{n+s-1}^{(1)} - E_0^{(1)})}} B_{s-1} \cdots B_2 B_1 \Psi_{n+s-1}^{(1)}. \quad (3.25)$$

Dabei gibt s die Zugehörigkeit zum s -ten Hamiltonoperator H_s an und läuft von 1 bis p .

Teil III. Die δ -Entwicklung in der supersymmetrischen Quantenmechanik

4. Die δ -Entwicklung

Die δ -Entwicklung ist eine wichtige Näherungsmethode, die aus der Quantenfeldtheorie stammt und auf der Einführung eines Störungsparameters δ beruht. Es handelt sich bei der δ -Entwicklung um eine künstliche Störungstheorie. Als solche hat sie die Vorteile, nicht störungstheoretisch in einem physikalischen Parameter zu sein und einen Konvergenzradius zu haben, der ungleich Null ist. Der Übergang von der Feldtheorie zur Quantenmechanik führt auf das Potential

$$V(x) = \frac{1}{2}M^{2+\delta}x^{2+2\delta}, \quad (4.1)$$

wobei M ein Massenskalierungs-Parameter ist. In der supersymmetrischen Quantenmechanik kann mit Hilfe der δ -Entwicklung die Grundzustandsenergie $E_0 = E_0(\delta)$ dieses nicht exakt lösbarer Potentials als Funktion von δ abgeschätzt werden.

Da eine spezielle Wahl von M und δ zu dem Potential des harmonischen Oszillators bzw. zu anharmonischen Potentialen führt

$$\delta = 0, \quad M = \sqrt{m}\omega \quad \Rightarrow \quad V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2, \quad (4.2a)$$

$$\delta = 1, \quad M = (2g)^{\frac{1}{3}} \quad \Rightarrow \quad V(x) = gx^4, \quad (4.2b)$$

$$\delta = 2, \quad M = (2g)^{\frac{1}{4}} \quad \Rightarrow \quad V(x) = gx^6, \quad (4.2c)$$

$$\delta = 3, \quad M = (2g)^{\frac{1}{5}} \quad \Rightarrow \quad V(x) = gx^8, \quad (4.2d)$$

$$\vdots \quad \vdots \quad \vdots$$

bietet die δ -Entwicklung eine Alternative zum Ritz'schen Variationsverfahren oder anderen Verfahren, um die Grundzustandsenergien anharmonischer Potentiale abzuschätzen. Der Parameter δ gibt dabei die Anharmonizität des Potentials an. Die δ -Entwicklung lässt sich außerdem auf alle Potentiale der Form $V(x) = M(V_0(x)/M)^{1+2\delta}$ anwenden, wobei $V_0(x)$ ein exakt lösbares Potential sein muss.

Bender et. al. zeigten in [3], dass die δ -Entwicklung in der Quantenmechanik einen Konvergenzradius von Eins besitzt. Außerdem zeigten sie, dass, wenn $|\delta| > 1$ ist, eine analytische Weiterführung der Störungsreihe mittels Padé-Approximationen gute numerische Werte liefert.

Im Folgenden sei $\hbar = m = 1$.

4.1. Abschätzung der Grundzustandsenergie

Um die Grundzustandsenergie E_0 des Potentials (4.1) mit Hilfe der Supersymmetrie abzuschätzen, löst man die Riccati-Gleichung störungstheoretisch in δ . Dazu geht man davon aus, dass sowohl die Grundzustandsenergie E_0 als auch das Superpotential $W(x)$ in Potenzreihen nach δ entwickelt

werden können:

$$E_0 = \sum_{n=0}^{\infty} e_n \delta^n = e_0 + \delta e_1 + \delta^2 e_2 + \dots, \quad (4.3)$$

$$W(x) = \sum_{n=0}^{\infty} W_n(x) \delta^n = W_0(x) + \delta W_1(x) + \delta^2 W_2(x) + \dots. \quad (4.4)$$

Auch das Potential $V(x)$ aus (4.1) entwickelt man unter Ausnutzung von $a^x = e^{x \ln a}$ und $e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$ und erhält

$$V(x) = \frac{1}{2} M^2 x^2 M^\delta x^{2\delta} = \frac{1}{2} M^2 x^2 e^{\delta \ln M x^2} = \frac{1}{2} M^2 x^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\delta^n}{n!} (\ln M x^2)^n. \quad (4.5)$$

Wie genau diese Entwicklung das Potential wiedergibt, lässt sich am besten graphisch zeigen. Dazu sind in Abb. 4.1 neben den Potentialen aus (4.2b)-(4.2d) (mit $g = 1$) die ersten sechs bzw. zwölf Terme der Reihenentwicklung (4.5) sowie die [1,1] und [2,2] Padé-Approximation dargestellt. Diese lauten

$$V_{[1,1]}(x) = \frac{M^2 x^2 (\delta \ln M + 2\delta \ln x + 2)}{4 - 2\delta(\ln M + 2 \ln x)}, \quad (4.6a)$$

$$V_{[2,2]}(x) = \frac{M^2 x^2 [(\delta \ln M + 2\delta \ln x)(\delta \ln M + 2\delta \ln x + 6) + 12]}{2[(\delta \ln M + 2\delta \ln x)(\delta \ln M + 2\delta \ln x - 6) + 12]}. \quad (4.6b)$$

Wie man sieht, werden die Potentiale schon durch die [1,1] Padé-Approximation wesentlich besser wiedergegeben als durch die ersten sechs bzw. zwölf Terme der Reihenentwicklung. Die [2,2] Padé-Approximation liefert noch bessere Ergebnisse und ist für $x < 1$ nicht von den Potentialen zu unterscheiden.

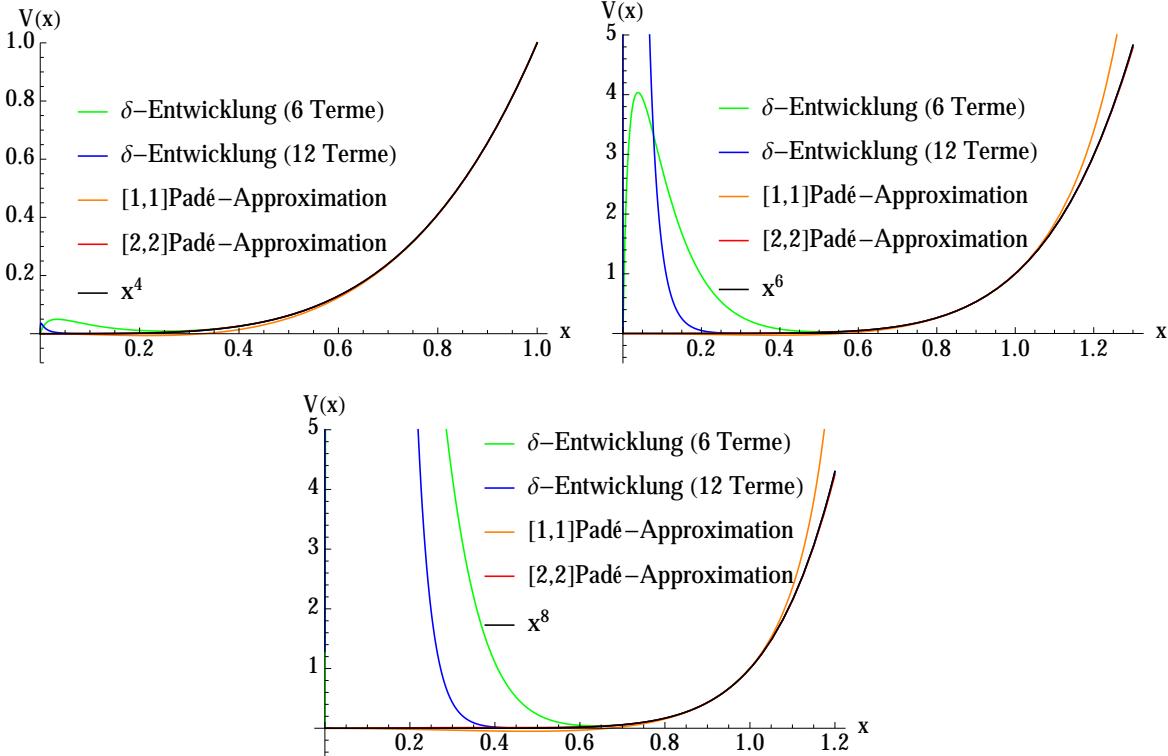


Abbildung 4.1. – Vergleich der Potentiale $V(x) = x^{2n}, n = 2, 3, 4$ mit den ersten sechs bzw. zwölf Termen der Reihenentwicklung (4.5), der [1,1] Padé-Approximation (4.6a) und der [2,2] Padé-Approximation (4.6b).

Aus $V(x)$ bildet man durch Subtraktion von E_0 das Potential

$$\begin{aligned} V_-(x) &= \frac{1}{2}M^{2+\delta}x^{2+2\delta} - E_0 \\ &= \frac{1}{2}M^2x^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\delta^n}{n!} (\ln Mx^2)^n - \sum_{n=0}^{\infty} e_n \delta^n \\ &= \frac{1}{2}M^2x^2 \left(1 + \delta \ln Mx^2 + \frac{\delta^2}{2} \ln^2 Mx^2 + \dots \right) - e_0 - \delta e_1 - \delta^2 e_2 - \dots \end{aligned} \quad (4.7)$$

Setzt man dies nun zusammen mit $W(x)$ aus (4.4) in die Riccati-Gleichung (2.16) ein, erhält man

$$\begin{aligned} M^2x^2 \left(1 + \delta \ln Mx^2 + \frac{\delta^2}{2} \ln^2 Mx^2 + \dots \right) - 2e_0 - 2\delta e_1 - 2\delta^2 e_2 - \dots &= \\ (W_0 + \delta W_1 + \delta^2 W_2 + \dots)^2 - W'_0 - \delta W'_1 - \delta^2 W'_2 - \dots &= \end{aligned}$$

Durch Ordnen nach Potenzen von δ erhält man für die ersten drei Ordnungen $\mathcal{O}(\delta^0)$, $\mathcal{O}(\delta^1)$ und $\mathcal{O}(\delta^2)$ das Gleichungssystem

$$M^2x^2 - 2e_0 = W_0^2 - W'_0 \quad (4.8a)$$

$$M^2x^2 \ln Mx^2 - 2e_1 = 2W_0W_1 - W'_1 \quad (4.8b)$$

$$\frac{1}{2}M^2x^2 \ln^2 Mx^2 - 2e_2 = 2W_0W_2 + W_1^2 - W'_2. \quad (4.8c)$$

Aus diesen Gleichungen können nun e_0 , e_1 und e_2 bestimmt werden.

Gleichung (4.8a) wird durch

$$W_0 = Mx \quad \text{und} \quad e_0 = \frac{1}{2}M$$

gelöst, wie man leicht durch Einsetzen bestätigt. In niedrigster Ordnung werden also exakt die Ergebnisse für den harmonischen Oszillatator reproduziert.

Die Gleichungen (4.8b) und (4.8c) sind lineare Differentialgleichungen erster Ordnung, deren Standardlösungen (bzw. Integraldarstellungen)

$$W_1(x) = e^{Mx^2} \int_0^x (2e_1 - M^2y^2 \ln My^2) e^{-My^2} dy \quad (4.9)$$

$$W_2(x) = e^{Mx^2} \int_0^x \left(W_1^2(y) - \frac{1}{2}M^2y^2 \ln^2 My^2 + 2e_2 \right) e^{-My^2} dy \quad (4.10)$$

lauten, wobei die Randbedingungen $W_n(0) = 0$ ausgenutzt wurden. Um e_1 zu bestimmen, betrachtet man zunächst die Grundzustandswellenfunktion von H_- in erster Ordnung

$$\begin{aligned} \Psi_0^-(x) &= N \exp \left\{ - \int_0^x W(y) dy \right\} \simeq N \exp \left\{ - \int_0^x (W_0(y) + \delta W_1(y)) dy \right\} \\ &\simeq N \exp \left\{ - \int_0^x W_0(y) dy \right\} \left(1 - \delta \int_0^x W_1(y) dy \right) \\ &= N e^{-\frac{Mx^2}{2}} \left(1 - \delta \int_0^x W_1(y) dy \right), \end{aligned} \quad (4.11)$$

welche normierbar sein muss. Dies ist genau dann der Fall, wenn $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} W_1(x) = 0$ gilt, wodurch man aus (4.9) die Bedingung

$$0 \stackrel{!}{=} \int_0^\infty (2e_1 - M^2y^2 \ln My^2) e^{-My^2} dy = e_1 \sqrt{\frac{\pi}{M}} - \int_0^\infty (M^2y^2 \ln My^2) e^{-My^2} dy$$

erhält, die nach e_1 umgestellt werden kann und so die Bestimmungsgleichung

$$e_1 = \sqrt{\frac{M}{\pi}} \int_0^\infty \left(M^2 y^2 \ln M y^2 \right) e^{-M y^2} dy \quad (4.12)$$

liefert. Durch die Substitution $t = \sqrt{M} y$ lässt sich (4.12) auf ein aus [4, 11] bekanntes Integral bringen und man erhält

$$\begin{aligned} e_1 &= \sqrt{\frac{M}{\pi}} \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{M}} e^{-t^2} M t^2 \ln t^2 dt = \frac{2M}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-t^2} t^2 \ln t dt \\ &= \frac{M}{4} (2 - 2 \ln 2 - \gamma) \end{aligned} \quad (4.13)$$

mit der Euler-Konstanten $\gamma \simeq 0,577\,216$. Der Ausdruck (4.13) lässt sich auch durch die Digammafunktion $\Psi(x) = \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)}$ ausdrücken [11]:

$$e_1 = \frac{M}{4} \Psi\left(\frac{3}{2}\right). \quad (4.14)$$

Mit der Kenntnis von e_1 ist es möglich, die Grundzustandswellenfunktion in erster Näherung numerisch zu berechnen. Dazu wurde mit *Mathematica* [20] eine Wertetabelle im Intervall $[-3:3]$ mit einer Schrittweite von 0,1 erstellt. Diese Daten wurden mit *gnuplot* [18] durch eine Funktion der Form $\Psi(x) = (a - bx^2)e^{-cx^2}$ gefüttet. Aus der Bedingung $N^2 \int_{-\infty}^\infty |\Psi(x)|^2 dx = 1$ lässt sich dann die Normierungskonstante N näherungsweise bestimmen. Die Grundzustandswellenfunktionen sind in Abb. 4.2 und 4.3 dargestellt. Mit dem Numerov-Algorithmus wurden die Wellenfunktionen zusätzlich numerisch berechnet und ebenfalls in Abb. 4.2 und 4.3 dargestellt. Für die numerische Berechnung wurde das unter [1] erhältliche Fortran-Programm verwendet¹. In diesem Programm ist auch eine Shooting-Methode implementiert, die später zur Berechnung der Eigenwerte genutzt wird.

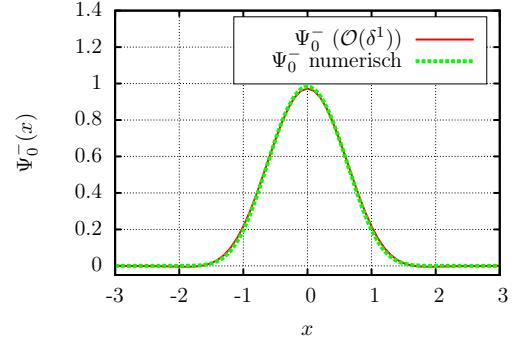


Abbildung 4.2. – Grundzustandswellenfunktion des Potentials $V(x) = x^4$ nach (4.11) und numerisch nach dem Numerov-Algorithmus.

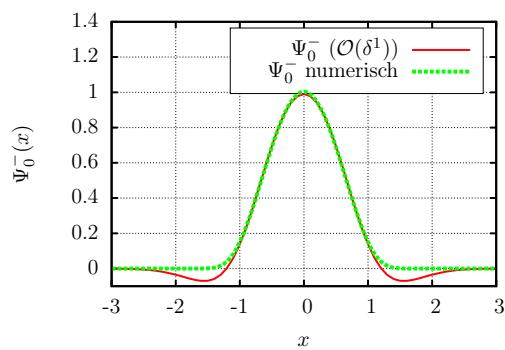
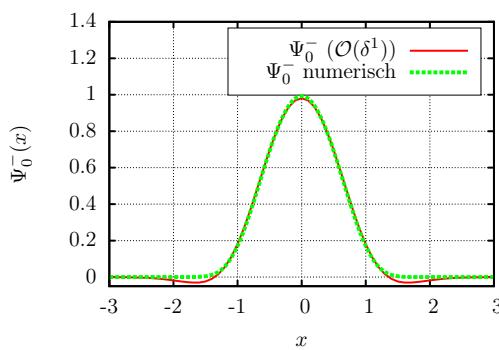


Abbildung 4.3. – Grundzustandswellenfunktionen der Potentiale $V(x) = x^6$ (links) und $V(x) = x^8$ (rechts) nach (4.11) und numerisch nach dem Numerov-Algorithmus.

¹Das Programm ist für das Potential $V(x) = 1/2 \cdot kx^2$ geschrieben. Für die Anwendung auf die Potentiale $V(x) = gx^{2n}$, $n = 2, 3, 4$ muss das Potential in Zeile 39 entsprechend ersetzt werden.

Die Grundzustandsenergie in erster Näherung lautet

$$E_0 = e_0 + \delta e_1 + \mathcal{O}(\delta^2) = M \left[\frac{1}{2} + \delta \frac{1}{4} \Psi\left(\frac{3}{2}\right) \right] + \mathcal{O}(\delta^2). \quad (4.15)$$

Um e_2 zu berechnen, geht man analog wie bei der Bestimmung von e_1 vor.

Aus der Betrachtung der Grundzustandswellenfunktion in 2. Näherung und Forderung der Normierbarkeit, erhält man die Bedingung

$$\int_0^\infty \left(W_1^2(y) - \frac{1}{2} M^2 y^2 \ln^2 M y^2 + 2e_2 \right) e^{-M y^2} dy \stackrel{!}{=} 0. \quad (4.16)$$

Nach e_2 umgestellt liefert dies

$$e_2 = \sqrt{\frac{M}{\pi}} \int_0^\infty \left(\frac{1}{2} M^2 x^2 \ln^2 M x^2 - W_1^2(x) \right) e^{-M x^2} dx. \quad (4.17)$$

Mit Hilfe der Substitution $t = x^2$ kann dies mit *Mathematica* numerisch integriert werden und man erhält $e_2 \approx 0,038213$. Dies stimmt mit dem numerischen Wert der analytischen Lösung

$$e_2 = \frac{M}{128} \left\{ -\Psi''\left(\frac{3}{2}\right) - 8\Psi'\left(\frac{3}{2}\right) \ln(2) + 8\Psi^2\left(\frac{3}{2}\right) - 16\Psi\left(\frac{3}{2}\right) + 32 - 32 \ln(2) \right\}, \quad (4.18)$$

die Bender et al. in [2] bzw. Cooper et al. in [6] fanden, überein. Die Grundzustandsenergie in 2. Näherung lautet somit

$$E_0 = e_0 + \delta e_1 + \delta^2 e_2 + \mathcal{O}(\delta^3) = M \left[\frac{1}{2} + \delta \frac{1}{4} \Psi\left(\frac{3}{2}\right) + \delta^2 \frac{1}{128} \left\{ -\Psi''\left(\frac{3}{2}\right) - 8\Psi'\left(\frac{3}{2}\right) \ln(2) + 8\Psi^2\left(\frac{3}{2}\right) - 16\Psi\left(\frac{3}{2}\right) + 32 - 32 \ln(2) \right\} \right] + \mathcal{O}(\delta^3) \quad (4.19)$$

Mit den Werten für δ und M aus den Gleichungen (4.2b) bis (4.2d) können damit die Grundzustandsenergien der anharmonischen Potentiale gx^4 , gx^6 und gx^8 abgeschätzt werden. Der Idee von Bender et al. folgend, wird noch die [1,1] Padé-Approximation von $E_0 = e_0 + \delta e_1 + \delta^2 e_2$ berechnet. Sie lautet

$$E_{[1,1]} = \frac{e_0 e_1 + \delta(e_1^2 - e_0 e_2)}{e_1 - \delta e_2}. \quad (4.20)$$

In den Abb. 4.4 bis 4.6 sind die Energien in erster, zweiter Ordnung und die [1,1] Padé-Approximationen in Abhängigkeit von g dargestellt. In den Tabellen 4.1 bis 4.3 sind die in erster, zweiter Ordnung berechneten Energien und die [1,1] Padé-Approximationen für verschiedene Werte von g zusammengefasst und mit Literaturwerten aus [12] und numerisch berechneten Werten verglichen.

Man sieht, dass nur für das Potential $V(x) = x^4$ das Ergebnis in zweiter Ordnung genauer ist als das Ergebnis in erster Ordnung. Der relative Fehler zum numerischen Wert beträgt hier jedoch schon über 3 %. Für die beiden anderen Potentiale x^6 und x^8 ist der Wert aus der ersten Ordnung genauer als der aus der zweiten Ordnung. Die relativen Fehler sind mit über 9 % bzw. 13 % unerfreulich groß. Auch die [1,1] Padé-Approximation liefert keine genaueren Ergebnisse als die erste Ordnung. Es sei jedoch erwähnt, dass Bender et al. in [3] feststellten, dass die Koeffizienten von $E_0(\delta)$ wechselnde Vorzeichen besitzen. Das Ergebnis in dritter Ordnung würde das Ergebnis aus zweiter Ordnung also nach unten korrigieren. Allerdings stellt die Berechnung der Energiekorrektur in dritter Ordnung nicht nur analytisch, sondern auch numerisch ein Problem dar. Außerdem basiert die Aussage von Bender et al., Padé-Approximationen liefern gute numerische Werte, wenn $|\delta| > 1$ ist, auf [3,2] und [5,4] Padé-Approximationen. Um diese hier berechnen zu können, müsste man $E_0(\delta)$ bis zur einschließlich sechsten Ordnung berechnen. Dies stellt jedoch einen sehr hohen Aufwand dar. Da das Ritz'sche Variationsverfahren mit einer einfachen einparametrischen Testfunktion bereits bessere Ergebnisse liefert als die δ -Entwicklung in zweiter bzw. erster Ordnung – wie in Abs. 5.1 gezeigt wird –, ist dieser Aufwand unverhältnismäßig hoch.

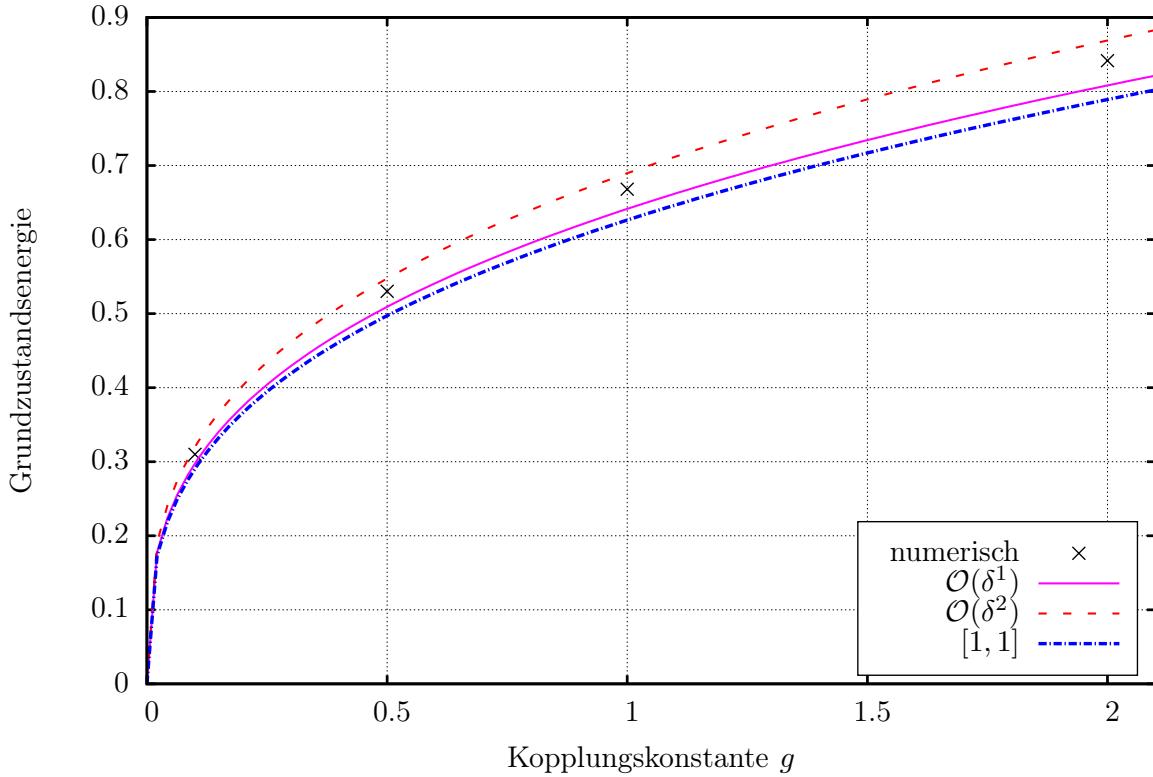


Abbildung 4.4. – Grundzustandsenergie $E_0^{(4)}$ des anharmonischen Potentials $V(x) = gx^4$ in Abhängigkeit von g in erster und zweiter Ordnung (nach (4.15) und (4.19)) und die [1,1] Padé-Approximation (nach (4.20)).

Tabelle 4.1. – Grundzustandsenergie $E_0^{(4)}$ des anharmonischen Potentials $V(x) = gx^4$ für verschiedene Werte von g in 1. und 2. Ordnung sowie die [1,1] Padé-Approximation.

g	$E_0^{(4)}$ (δ -Entwicklung)	$E_0^{(4)}$ aus [12] / numerisch	relativer Fehler (%)
0,01	$\mathcal{O}(\delta^1)$: 0,138197		3,972
	$\mathcal{O}(\delta^2)$: 0,148570	0,143913	3,236
	[1,1]: 0,134944		6,232
0,1	$\mathcal{O}(\delta^1)$: 0,297737		3,972
	$\mathcal{O}(\delta^2)$: 0,320084	0,310052	3,236
	[1,1]: 0,290729		6,232
0,5	$\mathcal{O}(\delta^1)$: 0,509122		3,972
	$\mathcal{O}(\delta^2)$: 0,547335	0,530181	3,235
	[1,1]: 0,497139		6,232
1	$\mathcal{O}(\delta^1)$: 0,641454		3,972
	$\mathcal{O}(\delta^2)$: 0,689599	0,667986	3,236
	[1,1]: 0,626356		6,232
2	$\mathcal{O}(\delta^1)$: 0,808182		3,972
	$\mathcal{O}(\delta^2)$: 0,868841	0,841610	3,236
	[1,1]: 0,789159		6,232
100	$\mathcal{O}(\delta^1)$: 2,977366		3,979
	$\mathcal{O}(\delta^2)$: 3,200840	3,100751	3,228
	[1,1]: 2,907288		6,239

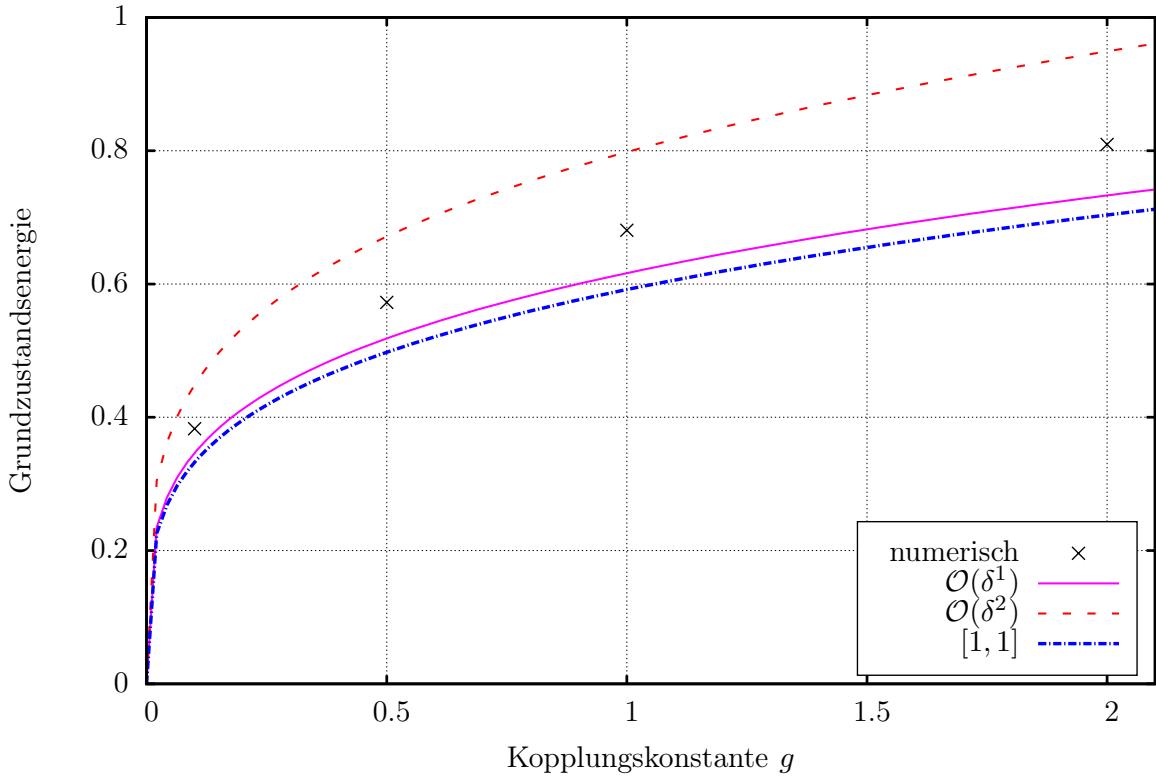


Abbildung 4.5. – Grundzustandsenergie $E_0^{(6)}$ des anharmonischen Potentials $V(x) = gx^6$ in Abhängigkeit von g in erster und zweiter Ordnung (nach (4.15) und (4.19)) und die [1,1] Padé-Approximation (nach (4.20)).

Tabelle 4.2. – Grundzustandsenergie $E_0^{(6)}$ des anharmonischen Potentials $V(x) = gx^6$ für verschiedene Werte von g in 1. und 2. Ordnung sowie die [1,1] Padé-Approximation.

g	$E_0^{(6)}$ (δ -Entwicklung)	$E_0^{(6)}$ aus [12] / numerisch	relativer Fehler (%)
0,01	$\mathcal{O}(\delta^1)$: 0,194891		9,461
	$\mathcal{O}(\delta^2)$: 0,252373	0,215256	17,243
	[1,1]: 0,187100		13,080
0,1	$\mathcal{O}(\delta^1)$: 0,346571		9,461
	$\mathcal{O}(\delta^2)$: 0,448789	0,382788	17,242
	[1,1]: 0,332716		13,081
0,5	$\mathcal{O}(\delta^1)$: 0,518245		9,461
	$\mathcal{O}(\delta^2)$: 0,671097	0,572401	17,242
	[1,1]: 0,497527		13,081
1	$\mathcal{O}(\delta^1)$: 0,616301		9,461
	$\mathcal{O}(\delta^2)$: 0,798073	0,680704	17,242
	[1,1]: 0,591663		13,081
2	$\mathcal{O}(\delta^1)$: 0,732909		9,461
	$\mathcal{O}(\delta^2)$: 0,949074	0,809498	17,242
	[1,1]: 0,703609		13,081
100	$\mathcal{O}(\delta^1)$: 1,948914		9,452
	$\mathcal{O}(\delta^2)$: 2,523728	2,152344	17,255
	[1,1]: 1,871002		13,071

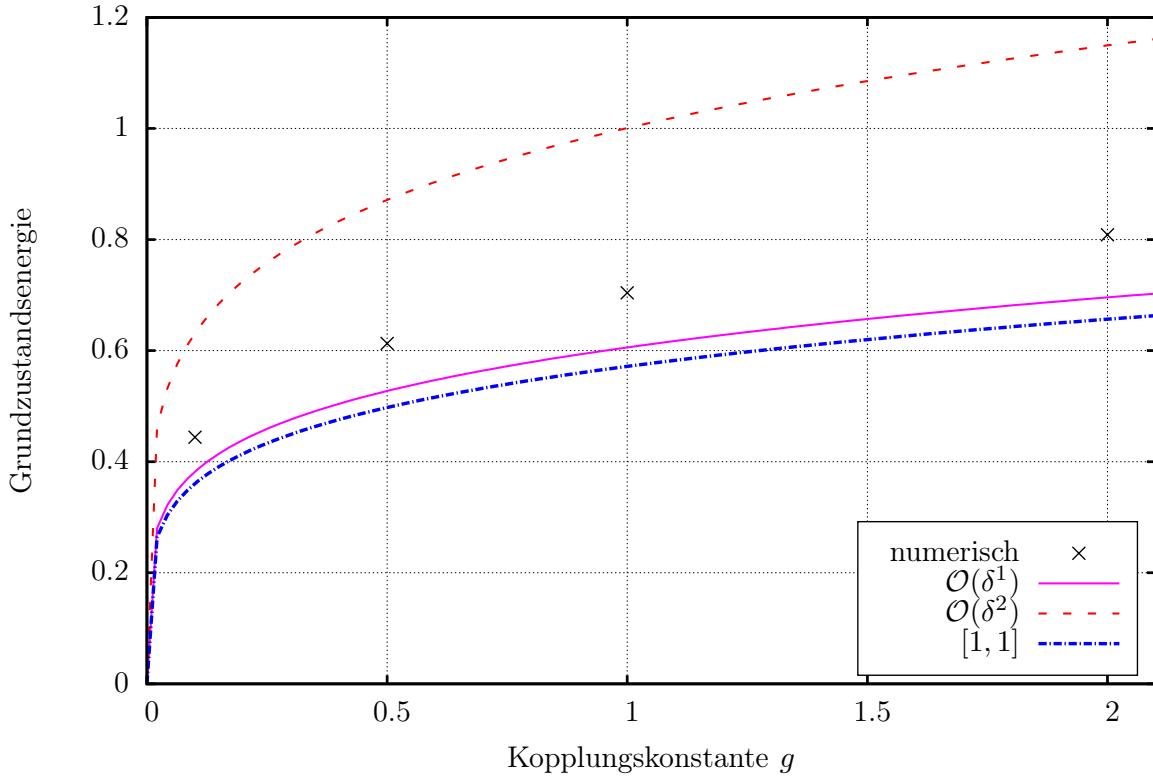


Abbildung 4.6. – Grundzustandsenergie $E_0^{(8)}$ des anharmonischen Potentials $V(x) = gx^8$ in Abhängigkeit von g in erster und zweiter Ordnung (nach (4.15) und (4.19)) und die [1,1] Padé-Approximation (nach (4.20)).

Tabelle 4.3. – Grundzustandsenergie $E_0^{(8)}$ des anharmonischen Potentials $V(x) = gx^8$ für verschiedene Werte von g in 1. und 2. Ordnung sowie die [1,1] Padé-Approximation.

g	$E_0^{(8)}$ (δ -Entwicklung)	$E_0^{(8)}$ aus [12] / numerisch	relativer Fehler (%)
0,01	$\mathcal{O}(\delta^1)$: 0,241168		13,955
	$\mathcal{O}(\delta^2)$: 0,398443	0,280283	42,158
	[1,1]: 0,227571		18,807
0,1	$\mathcal{O}(\delta^1)$: 0,382225		13,957
	$\mathcal{O}(\delta^2)$: 0,631489	0,444225	42,155
	[1,1]: 0,360675		18,808
0,5	$\mathcal{O}(\delta^1)$: 0,527367		13,957
	$\mathcal{O}(\delta^2)$: 0,871284	0,612910	42,155
	[1,1]: 0,497634		18,808
1	$\mathcal{O}(\delta^1)$: 0,605786		13,957
	$\mathcal{O}(\delta^2)$: 1,000842	0,704049	42,155
	[1,1]: 0,571631		18,808
2	$\mathcal{O}(\delta^1)$: 0,695866		13,957
	$\mathcal{O}(\delta^2)$: 1,149666	0,808740	42,155
	[1,1]: 0,656632		18,808
100	$\mathcal{O}(\delta^1)$: 1,521666		13,944
	$\mathcal{O}(\delta^2)$: 2,514002	1,768233	42,176
	[1,1]: 1,435873		18,796

4.2. Abschätzung der Energie des ersten angeregten Zustands

Mit Hilfe der in Abs. 3.3 vorgestellten Methoden kann die Energie des ersten angeregten Zustands abgeschätzt werden. Dabei nutzt man aus, dass die Energie E_1^- des ersten angeregten Zustands eines Hamiltonoperators H_- gleich der Energie des Grundzustandes E_0^+ seines Superpartners H_+ ist.

Man beginnt mit

$$H_+ = BB^\dagger = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V_+ = B_2^\dagger B_2 + E_1^- \quad (4.21)$$

Dabei ist

$$B_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(U + \frac{d}{dx} \right) \quad \text{und} \quad B_2^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(U - \frac{d}{dx} \right), \quad (4.22)$$

wobei hier für das Superpotential W_2 aus Abs. 3.3 die Notation U gewählt wurde, um es nicht mit δ^2 Term aus der Potenzreihenentwicklung für W zu verwechseln. Einsetzen von (4.22) in (4.21) liefert

$$W^2 + W' = U^2 + U' + 2E_1^- \quad (4.23)$$

Die Superpotentiale W und U sowie die Energie E_1^- entwickelt man analog zum letzten Abschnitt in Potenzreihen nach δ , wobei die ersten drei Terme W_0 , W_1 und W_2 der Potenzreihenentwicklung von W aus dem letzten Abschnitt bekannt sind. Einsetzen der Potenzreihenentwicklung in (4.23) und Ordnen nach Potenzen von δ liefert auch hier ein Gleichungssystem, dessen ersten beiden Gleichungen

$$W_0^2 + W_0' = U_0^2 - U_0' + 2e_0 \quad (4.24a)$$

$$2W_0W_1 + W_1' = 2U_0U_1 - U_1' + 2e_1 \quad (4.24b)$$

lauten. Aus diesen können e_1 und e_2 bestimmt werden.

Die erste Gleichung dieses Gleichungssystems wird durch

$$U_0 = Mx \quad \text{und} \quad e_0 = M \quad (4.25)$$

gelöst. Bei der zweiten Gleichung handelt es sich erneut um eine lineare Differentialgleichung erster Ordnung, die durch

$$U_1 = e^{Mx^2} \int_0^x e^{-My^2} (2e_1 - 2MyW_1 - W_1') dy, \quad (4.26)$$

gelöst wird. Da auch die Grundzustandswellenfunktion $\Psi_0^+ = N \exp \left\{ - \int_0^x U(y) dy \right\}$ normierbar sein muss, erhält man eine Bestimmungsgleichung für e_1 :

$$e_1 = \sqrt{\frac{M}{\pi}} \int_0^\infty e^{-Mx^2} (2MxW_1 + W_1') dx = \frac{M}{2} \left[\Psi\left(\frac{3}{2}\right) + 1 \right], \quad (4.27)$$

In der Tabelle 4.4 sind die Energien des ersten angeregten Zustandes in erster Näherung aufgeführt und mit numerisch berechneten Werten verglichen.

Auch hier sind die relativen Fehler sehr hoch. Es könnten natürlich theoretisch weitere Energiekorrekturen berechnet werden, um die Ergebnisse zu verbessern, praktisch stellt dies jedoch auf Grund komplizierter Doppel- und Dreifachintegrale ein Problem dar. Der Aufwand diese zu lösen ist wieder unverhältnismäßig groß, da Cooper et al. in [7] eine wesentlich einfachere Methode zur Abschätzung angeregter Zustände vorstellten, welche in Abs. 5.2 besprochen wird.

Tabelle 4.4. – Energien des ersten angeregten Zustands von $V(x) = gx^{2n}$ mit $n = 2,3,4$ für verschiedene Werte von g .

$V(x)$	g	E_1^- (δ -Entwicklung)	E_1^- numerisch	relativer Fehler (%)
gx^4	0,01	0,412115	0,515696	20,086
	1	1,912869	2,393702	20,087
	100	8,878751	11,113243	20,107
gx^6	0,01	0,765843	0,815791	6,123
	1	2,421808	2,579820	6,125
	100	7,658430	8,159630	6,142
gx^8	0,01	1,168293	1,087442	7,435
	1	2,934620	2,731554	7,434
	100	7,371432	6,862160	7,421

Teil IV. Vergleich der δ -Entwicklung mit anderen störungstheoretischen Methoden

5. Ritz'sches Variationsverfahren

Das Ritz'sche Variationsverfahren wird in der Quantenmechanik häufig angewandt und daher in fast allen Lehrbüchern über die Quantenmechanik behandelt. Folgender Abschnitt basiert auf [15].

Sei Ψ eine nicht notwendiger Weise normierte Wellenfunktion und sei der Hamiltonoperator H nach unten beschränkt, wobei E_0 der niedrigste Eigenwert sei. Grundlage des Ritz'schen Variationsverfahrens ist dann die Gleichung

$$E_0 = \inf_{\Psi} \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}, \quad (5.1)$$

welche man aus der Ungleichung $\langle \Psi | H | \Psi \rangle \geq E_0 \langle \Psi | \Psi \rangle$ erhält. Diese lässt sich mit Hilfe der Vollständigkeitsrelation $\sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbb{1}$ leicht beweisen:

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_n \langle \Psi | n \rangle E_n \langle n | \Psi \rangle \geq E_0 \sum_n \langle \Psi | n \rangle \langle n | \Psi \rangle = E_0 \langle \Psi | \Psi \rangle. \quad (5.2)$$

Eine obere Schranke E_V für die Grundzustandsenergie E_0 kann gefunden werden, indem man eine Schar von Probefunktionen $\Psi(x; \alpha_1, \dots, \alpha_p)$, die neben x noch von den Parametern α_i abhängen, wählt,

$$E(\alpha_1, \dots, \alpha_p) = \frac{\langle \Psi(x; \alpha_1, \dots, \alpha_p) | H | \Psi(x; \alpha_1, \dots, \alpha_p) \rangle}{\langle \Psi(x; \alpha_1, \dots, \alpha_p) | \Psi(x; \alpha_1, \dots, \alpha_p) \rangle} \quad (5.3)$$

und davon das Minimum

$$\min_{\{\alpha_i\}} E(\alpha_1, \dots, \alpha_p) = E_V \geq E_0 \quad (5.4)$$

berechnet.

5.1. Abschätzung der Grundzustandsenergien anharmonischer Potentiale mit dem Ritz'schen Variationsverfahren

Für die anharmonischen Potentiale $V(x) = x^{2n}$ mit $n = 2,3,4,5$ bietet sich als normierte, einparametrische Testfunktion eine Gaußfunktion der Form

$$\Psi(x; \alpha) = \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\alpha x^2} \quad (5.5)$$

an. Da die Testfunktion schon normiert ist, ist der Nenner in (5.3) gleich Eins und es bleibt $\langle \Psi(x; \alpha) | H | \Psi(x; \alpha) \rangle$ zu berechnen:

$$E^{(2n)}(\alpha) = \langle \Psi(x; \alpha) | H | \Psi(x; \alpha) \rangle = \left\langle \Psi \left| -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \right| \Psi \right\rangle + \langle \Psi | g x^{2n} | \Psi \rangle \quad (5.6)$$

$$= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{d}{dx} \Psi \right|^2 dx + 2g \int_0^{\infty} x^{2n} |\Psi|^2 dx \quad (5.7)$$

$$= \frac{\alpha}{2} + g \frac{\Gamma(n + 1/2)}{(2\alpha)^n \sqrt{\pi}}. \quad (5.8)$$

Für die Berechnung wurde hier das aus [11] bekannte bestimmte Integral

$$\int_0^{\infty} x^p e^{-ax^q} dx = \frac{1}{q} a^{-\frac{p+1}{q}} \Gamma\left(\frac{p+1}{q}\right), \quad p > -1, a > 0, q > 0 \quad (5.9)$$

benutzt. Aus der Bedingung $\frac{\partial E^{(2n)}(\alpha)}{\partial \alpha} = 0$ erhält man

$$\alpha_0 = \frac{1}{2} \left(\frac{4gn}{\sqrt{\pi}} \Gamma(n + 1/2) \right)^{\frac{1}{n+1}} \quad (5.10)$$

und somit folgende Werte für die oberen Schranken $E_V^{(n)}$:

$$E_V^{(4)} = \left(\frac{3}{4} \right)^{4/3} g^{1/3} \approx 0,681\,420 g^{1/3}, \quad (5.11a)$$

$$E_V^{(6)} = \frac{(5/2)^{1/4}}{\sqrt{3}} g^{1/4} \approx 0,725\,980 g^{1/4}, \quad (5.11b)$$

$$E_V^{(8)} = \frac{5}{16} 105^{1/5} g^{1/5} \approx 0,792\,662 g^{1/5}, \quad (5.11c)$$

$$E_V^{(10)} = \frac{3\sqrt{3}}{2\sqrt{2}} \frac{7^{1/6}}{5^{2/3}} g^{1/6} \approx 0,868\,974 g^{1/6}. \quad (5.11d)$$

Wie Cooper et al. in [8] zeigten, lassen sich mit einer zweiparametrischen (ebenfalls schon normierten) Testfunktion

$$\Psi(x; \alpha_1, \alpha_2) = N \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{\alpha_1} \right)^{\alpha_2} \right], \quad N = \left[\frac{\sqrt{\alpha_1}}{\alpha_2} \Gamma\left(\frac{1}{2\alpha_2}\right) \right]^{-1/2} \quad (5.12)$$

noch bessere Ergebnisse erzielen. Das Energiefunktional berechnet sich nach (5.7), wobei das zweite Integral durch die Substitution $y = x^2$ auf eine mit (5.9) lösbar Form gebracht werden kann. Man erhält

$$E^{(2n)}(\alpha_1, \alpha_2) = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{1}{2\alpha_2}\right)} \left[\frac{\alpha_2^2}{2\alpha_1} \Gamma\left(2 - \frac{1}{2\alpha_2}\right) + g\alpha_1^n \Gamma\left(\frac{n+1/2}{\alpha_2}\right) \right]. \quad (5.13)$$

Die Minimierung nach α_1 kann analytisch durchgeführt werden und liefert

$$\alpha_{10} = \left(\frac{\alpha_2^2 \Gamma\left(2 - \frac{1}{2\alpha_2}\right)}{2gn \Gamma\left(\frac{n+1/2}{\alpha_2}\right)} \right)^{\frac{1}{n+1}}. \quad (5.14)$$

Die Minimierung nach α_2 wurde numerisch mit *Mathematica* durchgeführt (mit $g = 1$):

$$n = 2 : \quad \alpha_1 = 0,666\,721 \quad \alpha_2 = 1,183\,458 \quad \rightarrow \quad E_V^{(4)} = 0,669\,330 g^{1/3} \quad (5.15a)$$

$$n = 3 : \quad \alpha_1 = 0,649\,073 \quad \alpha_2 = 1,324\,546 \quad \rightarrow \quad E_V^{(6)} = 0,685\,984 g^{1/4} \quad (5.15b)$$

$$n = 4 : \quad \alpha_1 = 0,635\,600 \quad \alpha_2 = 1,440\,146 \quad \rightarrow \quad E_V^{(8)} = 0,715\,296 g^{1/5} \quad (5.15c)$$

$$n = 5 : \quad \alpha_1 = 0,624\,356 \quad \alpha_2 = 1,538\,517 \quad \rightarrow \quad E_V^{(10)} = 0,747\,637 g^{1/6}. \quad (5.15d)$$

In Abb. 6.1 sind die mit der Testfunktion (5.5) und (5.12) berechneten Energien in Abhängigkeit von g dargestellt. In den Tab. 6.1 bis 6.4 sind die Energien für verschiedene Werte von g angegeben und mit den Literaturwerten aus [12] und numerisch berechneten Werten verglichen.

Schon die einfache Testfunktion (5.5) liefert bessere Ergebnisse als die δ -Entwicklung. Die zweiparametrische Testfunktion (5.12) liefert noch bessere Ergebnisse und für das Potential $V(x) = x^4$ weichen die berechneten Grundzustandsenergien nur um 0,201 % von den numerischen Werten ab. Für die Potentiale $V(x) = x^6$, $V(x) = x^8$ und $V(x) = x^{10}$ liegen die relativen Fehler bei etwa 0,8 %, 1,6 % und 2,6 %. Hier liefert die im nächsten Kapitel vorgestellte logarithmische Störungstheorie bessere Ergebnisse.

5.2. Abschätzung der Energien des ersten angeregten Zustands

In [7, 8] zeigten Cooper et al. auch, wie man die Energiedifferenzen $E_0^{(k+1)} - E_0^{(k)}$ ($k = 1, 2, \dots$) zweier Zustände berechnen kann. Dazu betrachtet man die Grundzustandswellenfunktion $\Psi_0^{(k)}$ aus (5.12), mit der nach Gleichung (2.26) ein Superpotential verbunden ist. Um im Folgenden eine Unübersichtlichkeit durch viele Indizes zu vermeiden, werden folgende Bezeichnungen eingeführt:

$$\begin{aligned} \alpha_1^{(k)} &= a, & \alpha_1^{(k+1)} &= \alpha, \\ \alpha_2^{(k)} &= b, & \alpha_2^{(k+1)} &= \beta. \end{aligned}$$

Das Superpotential lautet dann

$$W_k(x) = \frac{b}{a^b} x^{2b-1}. \quad (5.16)$$

Da es unterschiedliche Vorzeichen für $x \rightarrow \infty$ und $x \rightarrow -\infty$ besitzt, ist die SUSY exakt und die Grundzustandsenergie $E_0^+ = E_1^-$ ($E_0^{(2)} = E_1^{(1)}$) des Partnerpotentials V_+ (V_2) entspricht der des ersten angeregten Zustandes von V_- (V_1). Deshalb betrachtet man den Hamiltonoperator $H_2 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V_2 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} (W_k^2 + W_k')$. Die ungefähren Energieabstände erhält man durch Minimierung des Funktionals

$$\Delta E = E_0^{(k+1)} - E_0^{(k)} = \frac{1}{2} \left\langle \Psi_0^{(k+1)} \left| -\frac{d^2}{dx^2} + W_k^2 + W_k' \right| \Psi_0^{(k+1)} \right\rangle, \quad (5.17)$$

welches mit (5.9) berechnet werden kann. Als Ergebnis erhält man folgende Rekursionsformel

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{1}{2\alpha \Gamma\left(\frac{1}{2\beta}\right)} \left[\beta^2 \Gamma\left(2 - \frac{1}{2\beta}\right) + b^2 \left(\frac{\alpha}{a}\right)^{2b} \Gamma\left(\frac{4b-1}{2\beta}\right) \right. \\ &\quad \left. + b \left(\frac{\alpha}{a}\right)^b (2b-1) \Gamma\left(\frac{2b-1}{2\beta}\right) \right]. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Die Minimierung nach α kann analytisch durchgeführt werden, die Minimierung nach β erfolgt dann numerisch. Mit den Werten für a und b aus dem letzten Abschnitt können kann die Energiedifferenz zwischen dem Grund- und dem ersten angeregten Zustand bestimmt werden.

Diese sind in Tab. 5.1 mitsamt den daraus folgenden ungefähren Energien E_1^- und numerisch berechneten Werten dargestellt.

Diese Methode liefert mit relativen Fehlern, die kleiner als 1 % sind, sehr viel bessere Ergebnisse als die δ -Entwicklung in Abs. 4.2 und ist mit deutlich weniger Rechenaufwand verbunden. Cooper et al. schrieben in [7, 8], dass diese Methode für die ersten drei angeregten Zustände des x^4 -Potentials bessere Ergebnisse liefert als eine WKB-Näherung in erster Ordnung. Für den vierten und folgende angeregte Zustände liefert diese jedoch bessere Ergebnisse.

Tabelle 5.1. – Energiedifferenzen ΔE zwischen dem Grund- und dem ersten angeregten Zustand der Potentiale $V(x) = x^{2n}$ mit $n = 2,3,4,5$ und die daraus folgenden ungefähren Energien E_1^- der angeregten Zustände verglichen mit numerisch berechneten Werten.

$V(x)$	g	ΔE	E_1^-	E_1^- numerisch	relativer Fehler (%)
gx^4	0,01	0,372196	\rightarrow 0,516399	0,515696	0,136
	1	1,727582	\rightarrow 2,393554	2,393702	0,006
	100	8,018727	\rightarrow 11,125484	11,113243	0,110
gx^6	0,01	0,598415	\rightarrow 0,815342	0,815791	0,055
	1	1,892354	\rightarrow 2,578338	2,579820	0,057
	100	5,984149	\rightarrow 8,153422	8,159630	0,076
gx^8	0,01	0,797435	\rightarrow 1,082200	1,087442	0,482
	1	2,003067	\rightarrow 2,718363	2,731554	0,483
	100	5,031476	\rightarrow 6,828219	6,862160	0,495
gx^{10}	0,01	0,968027	\rightarrow 1,315049	1,327988	0,974
	1	2,085551	\rightarrow 2,833188	2,861092	0,975
	100	4,493184	\rightarrow 6,103919	6,164544	0,983

6. Die lineare δ -Entwicklung und logarithmische Störungstheorie

Ist man an der Grundzustandsenergie E_0 eines beliebigen Potentials interessiert, kann man mit Hilfe der logarithmischen Störungstheorie auf einfache Weise Energiekorrekturen beliebiger Ordnung berechnen. Gegenüber der in der nicht relativistischen Quantenmechanik häufig verwendeten Rayleigh-Schrödinger Störungstheorie stellt dies einen Vorteil dar, da bei dieser über alle möglichen Eigenzustände summiert werden muss, um Energiekorrekturen über die erste Ordnung hinaus zu berechnen. Da diese Eigenzustände für die meisten Systeme nicht genau bekannt sind, können keine höheren Energiekorrekturen berechnet werden. In der logarithmischen Störungstheorie reicht allein die Kenntnis der Grundzustandswellenfunktion Ψ_0 , um Energiekorrekturen beliebiger Ordnung zu berechnen, wie nun gezeigt wird.

Man startet mit der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x) = E\Psi(x). \quad (6.1)$$

Im Gegensatz zur in Teil. III vorgestellten δ -Entwicklung entwickelt man das Potential $V(x)$ bis zum linearen Term nach δ :

$$V(x) = V_0(x) + \delta V_1(x). \quad (6.2)$$

Dabei sei V_0 ein lösbares Potential. Einsetzen von (6.2) in (6.1) führt zu

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + (V_0(x) + \delta V_1(x)) \right] \Psi(x) = E\Psi(x). \quad (6.3)$$

Für $\Psi(x)$ wählt man den Ansatz

$$\Psi(x) = e^{S(x)}, \quad (6.4)$$

setzt diesen in (6.3) ein und erhält somit

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (S''(x) + S'^2(x)) + (V_0(x) + \delta V_1(x)) = E. \quad (6.5)$$

Entwickelt man E_0 und $S(x)$ in Potenzreihen nach δ

$$E_0 = e_0 + \delta e_1 + \delta^2 e_2 + \dots, \quad (6.6)$$

$$S(x) = S_0(x) + \delta S_1(x) + \delta^2 S_2(x) + \dots, \quad (6.7)$$

setzt diese in (6.5) ein und ordnet nach Potenzen von δ , erhält man:

$$S''_0(x) + S'^2_0(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0(x) - e_0) \quad (6.8a)$$

$$S''_1(x) + 2S'_0(x)S'_1(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (V_1(x) - e_1) \quad (6.8b)$$

$$S''_2(x) + 2S'_0(x)S'_2(x) + S'^2_1(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} e_2 \quad (6.8c)$$

⋮

Bei (6.8a) handelt es sich um die Gleichung des ungestörten Systems, dessen Wellenfunktion $\Psi_0(x) = \exp(S_0(x))$ bekannt sei. Alle weiteren Gleichungen können dann rekursiv gelöst werden. Gleichung (6.8b) kann umgeschrieben werden zu

$$\left(S'_1(x)e^{2S_0(x)}\right)' = \frac{2m}{\hbar^2} \left(V_1(x) - e_1\right) e^{2S_0(x)}. \quad (6.9)$$

Da $e^{2S_0(x)} = (e^{S_0(x)})^2 = \Psi_0^2(x)$ und die Wellenfunktion im Unendlichen verschwindet, liefert eine Integration von Gleichung (6.9) in den Grenzen $\pm\infty$ eine Bestimmungsgleichung für e_1 :

$$e_1 = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} V_1(x) \Psi_0^2(x) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0^2(x) dx}. \quad (6.10)$$

Durch Umschreiben von Gleichung (6.8c) zu

$$\left(S'_2(x)e^{2S_0(x)}\right)' = - \left(\frac{2m}{\hbar^2} e_2 + S'^2_1(x)\right) e^{2S_0(x)} \quad (6.11)$$

und Integration in den Grenzen $\pm\infty$ erhält man eine Bestimmungsgleichung für e_2 :

$$e_2 = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} S'^2_1(x) \Psi_0^2(x) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0^2(x) dx} = - \frac{\hbar^2}{m} \frac{\int_0^{\infty} S'^2_1(x) \Psi_0^2(x) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0^2(x) dx}. \quad (6.12)$$

Für die Berechnung von e_2 ist die Kenntnis von $S'_1(x)$ erforderlich. Dieses erhält man durch Integration von Gleichung (6.9) von 0 bis x und unter Ausnutzung der Randbedingung $S'_n(x) = 0, n = 0, 1, 2, \dots$:

$$S'_1(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{\Psi_0^2(x)} \int_0^x \left(V_1(y) - e_1\right) \Psi_0^2(y) dy. \quad (6.13)$$

Auf analoge Weise kann man weitere Energiekorrekturen bis zu beliebiger Ordnung berechnen.

6.1. Abschätzung der Grundzustandsenergien anharmonischer Potentiale mit der linearen δ -Entwicklung und logarithmischer Störungstheorie

Marques et al. zeigten in [14], dass mit Hilfe der logarithmischen Störungstheorie und des in Abs. 2.5 vorgestellten ε -Systems die Grundzustandsenergie des Potentials $V(x) = x^4$ abgeschätzt werden kann. Dies wird im Folgenden nachvollzogen, anschließend wird die Methode auf die Potentiale $V(x) = x^{2n}$ mit $n = 3, 4, 5$ angewandt.

Abschätzung der Grundzustandsenergie von $V(x) = x^4$ Da Marques et al. $m = 1/2$ setzten und die Operatoren B und B^\dagger (bzw. bei ihnen A und A^\dagger) als $A = W(x) + iP$ und $A^\dagger = W(x) - iP$ definierten, hier aber die Definitionen von B und B^\dagger aus (2.13) und $m = 1 (= \hbar)$ beibehalten werden sollen, muss das Superpotential mit dem Faktor $\sqrt{2}$ multipliziert werden. Außerdem wird im Folgenden der Einfachheit halber auch $g = 1$ gesetzt. Das zu betrachtende Superpotential lautet somit

$$W(x) = \sqrt{2} \varepsilon(x) x^2 \quad (6.14)$$

und führt über die Riccati-Gleichung $2V_\pm = W^2 \pm W'$ zu den Potentialen

$$V_\pm = x^4 \pm \sqrt{2} |x|. \quad (6.15)$$

Da die Supersymmetrie exakt ist ($W(x)$ hat unterschiedliche Vorzeichen für $x \rightarrow \pm\infty$), besitzt die Grundzustandswellenfunktion Ψ_0^- von V_- die Energie $E_0^- = 0$ und Ψ_0^- kann über Gleichung (2.21) bestimmt werden:

$$\begin{aligned}\Psi_0^-(x) &= N \exp\left(-\int_0^x W(y) dy\right) \\ &= N \exp\left(-\sqrt{2} \int_0^x \varepsilon(y) y^2 dy\right) \\ &= N \exp\left(-\sqrt{2} \frac{|x^3|}{3}\right).\end{aligned}\quad (6.16)$$

Dabei ist N die Normierungskonstante, die aus der Normierungsbedingung $1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_0^-(x)|^2 dx$ bestimmt werden kann. Das exakte Ergebnis der Grundzustandswellenfunktion von V_- lautet somit

$$\Psi_0^-(x) = \frac{3^{1/3}}{\sqrt{\sqrt{2} \Gamma(1/3)}} \exp\left(-\sqrt{2} \frac{|x^3|}{3}\right). \quad (6.17)$$

Dies ist durchaus bemerkenswert, da exakte Lösungen der Grundzustandswellenfunktionen von $V(x) = g^2 x^4$ oder $V(x) = \omega^2 x^2 + g^2 x^4$ nicht gefunden werden können.

Ausgehend von der exakten Lösung für $V_-(x)$ lässt sich mit Hilfe der logarithmischen Störungstheorie nun die Grundzustandsenergie des Potentials $V(x) = x^4$ abschätzen. Dazu beginnt man mit

$$V(x) = V_0(x) + \delta V_1(x) \quad (6.18a)$$

$$\text{mit } V_0(x) = V_-(x) = x^4 - \sqrt{2}|x| \quad (6.18b)$$

$$\text{und } V_1(x) = 2\sqrt{2}|x|. \quad (6.18c)$$

Für $\delta = 1/2$ ¹ erhält man das Potential $V(x) = x^4$. Die Gleichung des ungestörten Systems (6.8a) wird hier durch

$$S_0(x) = -\sqrt{2} \frac{|x^3|}{3} \quad \text{und} \quad e_0 = 0 \quad (6.19)$$

gelöst. Die erste Energiekorrektur erhält man aus Gleichung (6.10), wobei der Nenner gleich Eins ist, da $\Psi_0^-(x)$ bereits normiert ist. Es bleibt also zu berechnen:

$$e_1 = 2\sqrt{2} \left(\frac{3^{1/3}}{\sqrt{\sqrt{2} \Gamma(1/3)}} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} |x| \exp\left(-2\sqrt{2} \frac{|x^3|}{3}\right) dx = \frac{2 \cdot 3^{1/3} \Gamma(2/3)}{\Gamma(1/3)}. \quad (6.20)$$

Um e_2 bestimmen zu können, berechnet man $S'_1(x)$ nach (6.13) und erhält

$$S'_1(x) = \frac{2\sqrt{2} e^{-2\sqrt{2} \frac{|x^3|}{3}}}{3^{1/3} \Gamma(1/6)} \left[2^{2/3} \sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{1}{3}, 2\sqrt{2} \frac{|x^3|}{3}\right) - \Gamma(1/6) \Gamma\left(\frac{2}{3}, 2\sqrt{2} \frac{|x^3|}{3}\right) \right], \quad (6.21)$$

wobei $\Gamma(a, x) = \int_x^{\infty} t^{a-1} e^{-t} dt$ die unvollständige Gammafunktion der unteren Grenze ist. Die Bestimmungsgleichung (6.12) für e_2 enthält daher ein kompliziertes Integral, dessen numerische Lösung $e_2 \approx -0,276\,027$ lautet. Die Grundzustandsenergie des Potentials $V(x) = x^4$ lautet somit näherungsweise

$$E_0^{(4)}(\delta = 1/2) \approx e_0 + \frac{1}{2}e_1 + \frac{1}{4}e_2 \approx 0,660\,005. \quad (6.22)$$

Eine [1,1] Padé-Approximation liefert hier ein noch besseres Ergebnis, nämlich

$$E_{[1,1]}^{(4)}(\delta = 1/2) \approx 0,665\,972. \quad (6.23)$$

¹Für $\delta = 1$ kann außerdem die Grundzustandsenergie von V_+ berechnet werden. Siehe dazu [9, 14].

Abschätzung der Grundzustandsenergie von $V(x) = x^6$ Ausgehend von dem Superpotential $W(x) = \sqrt{2}x^3$ erhält man über die Riccati-Gleichung die Partnerpotentiale $V_{\pm} = x^6 \pm \frac{3}{2}\sqrt{2}x^2$. Wählt man

$$V_0 = x^6 - \frac{3}{2}\sqrt{2}x^2 \quad \text{und} \quad V_1 = 3\sqrt{2}x^2, \quad (6.24)$$

erhält man für $\delta = 1/2$ das Potential $V(x) = x^6$. Die Grundzustandswellenfunktion von V_- lautet nach (2.21)

$$\Psi_0^-(x) = \frac{2^{7/16}}{\sqrt{\Gamma(1/4)}} \exp\left(-\frac{\sqrt{2}}{4}x^4\right). \quad (6.25)$$

Für die erste Energiekorrektur erhält man nach (6.10)

$$e_1 = \frac{3 \cdot 2^{3/4} \Gamma(3/4)}{\Gamma(1/4)}, \quad (6.26)$$

für $S'_1(x)$ nach (6.13)

$$S'_1(x) = \frac{x e^{\frac{x^4}{\sqrt{2}}}}{\sqrt{2} \Gamma(1/4)} \left[4 \cdot 2^{1/4} \Gamma\left(\frac{7}{4}\right) E_{\frac{3}{4}}\left(\frac{x^4}{\sqrt{2}}\right) - 3x^2 \Gamma\left(\frac{1}{4}\right) E_{\frac{1}{4}}\left(\frac{x^4}{\sqrt{2}}\right) \right], \quad (6.27)$$

wobei $E_n(z) = \int_1^\infty e^{-zt} t^{-n} dt$ die Integralexponentialfunktion ist, und somit für die zweite Energiekorrektur nach (6.12)

$$e_2 = -\frac{4 \cdot 2^{1/4} \pi \ln(4)}{\Gamma^2(-3/4)}. \quad (6.28)$$

Damit lautet die Grundzustandsenergie des Potentials $V(x) = x^6$ näherungsweise

$$E_0^{(6)} \approx 0,631\,014. \quad (6.29)$$

Die [1,1] Padé-Approximation liefert

$$E_{[1,1]}^{(6)} \approx 0,676\,737. \quad (6.30)$$

Abschätzung der Grundzustandsenergie von $V(x) = x^8$ Um die Grundzustandsenergie des Potentials $V(x) = x^8$ abzuschätzen, startet man mit dem Superpotential $W(x) = \sqrt{2}x^4 \varepsilon(x)$. Hieraus erhält man $V_{\pm} = x^8 \pm 2\sqrt{2}|x|^3$, wählt

$$V_0 = x^8 - 2\sqrt{2}|x|^3 \quad \text{und} \quad V_1 = 4\sqrt{2}|x|^3 \quad (6.31)$$

und erhält für $\delta = 1/2$ das gewünschte Potential $V(x) = x^8$. Die Grundzustandswellenfunktion zu V_- lautet

$$\Psi_0^-(x) = \frac{5^{2/5}}{2^{7/20} \sqrt{\Gamma(1/5)}} \exp\left(-\sqrt{2} \frac{|x|^5}{5}\right), \quad (6.32)$$

womit man für e_1 nach (6.10)

$$e_1 = \frac{2 \cdot 10^{3/5} \Gamma(4/5)}{\Gamma(1/5)} \quad (6.33)$$

erhält. Für $S'_1(x)$ erhält man mit *Mathematica* hier keinen geschlossenen Ausdruck und e_2 muss numerisch bestimmt werden. Das Ergebnis lautet $e_2 \approx -1,777\,314$. Somit erhält man für die Grundzustandsenergie des Potentials $V(x) = x^8$

$$E_0^{(8)} \approx 0,565\,264. \quad (6.34)$$

Die [1,1] Padé-Approximation verbessert das Ergebnis auch hier und liefert

$$E_{[1,1]}^{(8)} \approx 0,701\,054. \quad (6.35)$$

Abschätzung der Grundzustandsenergie von $V(x) = x^{10}$ Das Superpotential $W(x) = \sqrt{2}x^5$ führt zu den Partnerpotentialen $V_{\pm} = x^{10} \pm \frac{5}{\sqrt{2}}x^4$, was die Wahl

$$V_0 = x^{10} - \frac{5}{\sqrt{2}}x^4 \quad \text{und} \quad V_1 = \frac{10}{\sqrt{2}}x^4 \quad (6.36)$$

nahelegt. Die normierte Grundzustandswellenfunktion lautet

$$\Psi_0^-(x) = \frac{1}{2^{11/24} 3^{1/12} \sqrt{\Gamma(7/6)}} \exp\left(-\frac{\sqrt{2}}{6}x^6\right) \quad (6.37)$$

und für e_1 erhält man

$$e_1 = \frac{5\Gamma(5/6)}{2^{5/6} 3^{1/3} \Gamma(7/6)}. \quad (6.38)$$

Für dieses Potential lässt sich $S'_1(x)$ wieder geschlossen angeben

$$S'_1(x) = -\frac{10 \cdot 2^{1/6} e^{\frac{\sqrt{2}x^6}{3}} x \Gamma(\frac{7}{6})}{3^{1/3} \Gamma^2(\frac{1}{6})} \left[6^{1/3} x^4 \Gamma\left(\frac{1}{6}\right) E_{\frac{1}{6}}\left(\frac{\sqrt{2}x^6}{3}\right) - 3\Gamma\left(\frac{5}{6}\right) E_{\frac{5}{6}}\left(\frac{\sqrt{2}x^6}{3}\right) \right], \quad (6.39)$$

allerdings lässt sich für e_2 kein geschlossener Ausdruck angeben. Der numerische Wert lautet $e_2 \approx -2,949\,764$ und führt zu einem Wert der Grundzustandsenergie von $E_0^{(10)} \approx 0,446\,245$, der sich mit Hilfe der [1,1] Padé-Approximation zu

$$E_{[1,1]}^{(10)} \approx 0,729\,318 \quad (6.40)$$

verbessern lässt.

In Abb. 6.1 sind die mit der logarithmischen Störungstheorie und der Padé-Approximation berechneten Grundzustandsenergien in Abhängigkeit von g dargestellt und in den Tab. 6.1 bis 6.4 sind sie für einige Werte von g mit den Werten aus [12] und numerisch berechneten Werten verglichen.

Für die Potentiale $V(x) = x^6$, $V(x) = x^8$ und $V(x) = x^{10}$ liefert diese Methode die besten Ergebnisse. Besonders bemerkenswert ist, dass der relative Fehler beim x^{10} -Potential kleiner als 0,075 % ist.

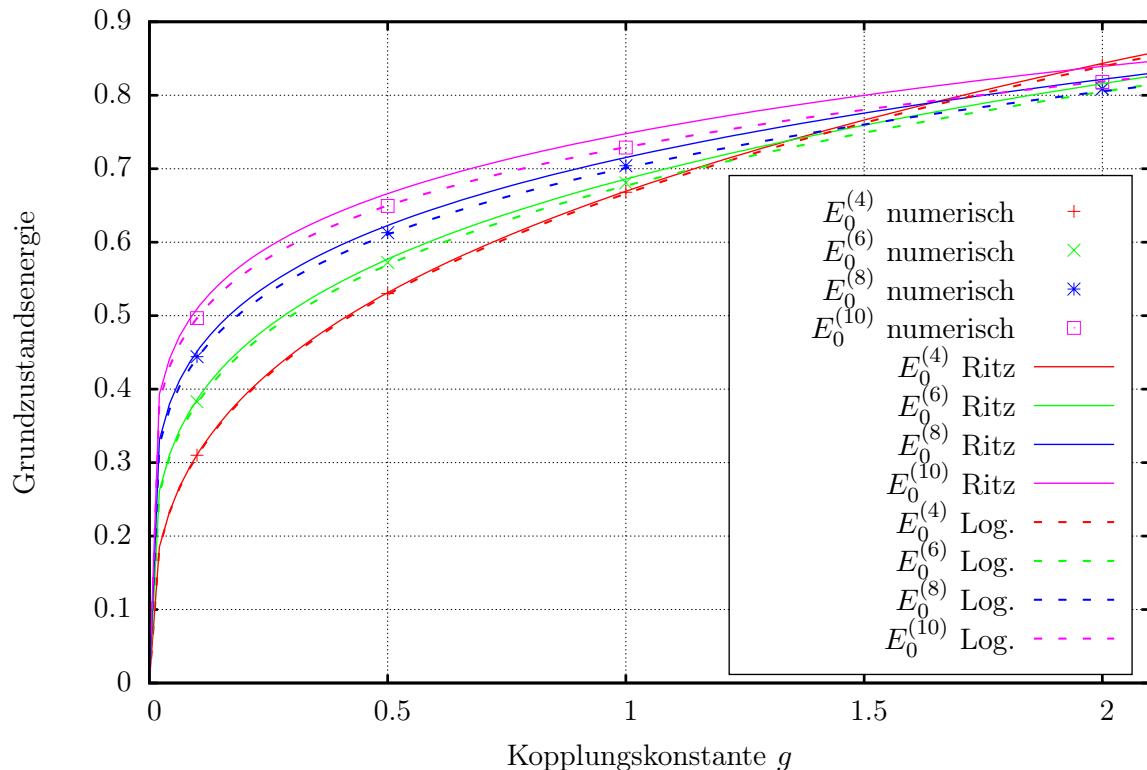


Abbildung 6.1. – Die Grundzustandsenergien $E_0^{(2n)}$ der anharmonischen Potentiale $V(x) = x^{2n}$ mit $n = 2, 3, 4, 5$ in Abhängigkeit von g nach dem Ritz'schen Variationsverfahren und nach logarithmischer Störungstheorie.

Tabelle 6.1. – Grundzustandsenergie $E_0^{(4)}$ des anharmonischen Potentials $V(x) = gx^4$ für verschiedene Werte von g , berechnet mit dem Ritz'schen Variationsverfahren und der logarithmischen Störungstheorie.

g	$E_0^{(4)}$ (Ritz / Log.)	$E_0^{(4)}$ aus [12] / numerisch	relativer Fehler (%)
0,01	Ritz mit (5.5): 0,146808		2,011
	Ritz mit (5.12): 0,144203	0,143913	0,201
	Log.: 0,143479		0,302
0,1	Ritz mit (5.5): 0,316287		2,011
	Ritz mit (5.12): 0,310676	0,310052	0,201
	Log.: 0,309117		0,302
0,5	Ritz mit (5.5): 0,540844		2,011
	Ritz mit (5.12): 0,531248	0,530181	0,201
	Log.: 0,528582		0,302
1	Ritz mit (5.5): 0,681420		2,011
	Ritz mit (5.12): 0,669330	0,667986	0,201
	Log.: 0,665972		0,302
2	Ritz mit (5.5): 0,858536		2,011
	Ritz mit (5.12): 0,843304	0,841610	0,201
	Log.: 0,839072		0,302
100	Ritz mit (5.5): 3,162872		2,003
	Ritz mit (5.12): 3,106757	3,100751	0,194
	Log.: 3,091167		0,309

Tabelle 6.2. – Grundzustandsenergie $E_0^{(6)}$ des anharmonischen Potentials $V(x) = gx^6$ für verschiedene Werte von g , berechnet mit dem Ritz'schen Variationsverfahren und der logarithmischen Störungstheorie.

g	$E_0^{(6)}$ (Ritz / Log.)	$E_0^{(6)}$ aus [12] / numerisch	relativer Fehler (%)
0,01	Ritz mit (5.5): 0,229575		6,652
	Ritz mit (5.12): 0,216927	0,215256	0,776
	Log.: 0,214003		0,582
0,1	Ritz mit (5.5): 0,408248		6,651
	Ritz mit (5.12): 0,385757	0,382788	0,776
	Log.: 0,380557		0,583
0,5	Ritz mit (5.5): 0,610474		6,651
	Ritz mit (5.12): 0,576842	0,572401	0,776
	Log.: 0,569066		0,583
1	Ritz mit (5.5): 0,725980		6,651
	Ritz mit (5.12): 0,685984	0,680704	0,776
	Log.: 0,676737		0,583
2	Ritz mit (5.5): 0,863340		6,651
	Ritz mit (5.12): 0,815778	0,809498	0,776
	Log.: 0,804781		0,583
100	Ritz mit (5.5): 2,295749		6,663
	Ritz mit (5.12): 2,169273	2,152344	0,787
	Log.: 2,140031		0,572

Tabelle 6.3. – Grundzustandsenergie $E_0^{(8)}$ des anharmonischen Potentials $V(x) = gx^8$ für verschiedene Werte von g , berechnet mit dem Ritz'schen Variationsverfahren und der logarithmischen Störungstheorie.

g	$E_0^{(8)}$ (Ritz / Log.)	$E_0^{(8)}$ aus [12] / numerisch	relativer Fehler (%)
0,01	Ritz mit (5.5): 0,315564		12,588
	Ritz mit (5.12): 0,284765	0,280283	1,599
	Log.: 0,279095		0,424
0,1	Ritz mit (5.5): 0,500136		12,586
	Ritz mit (5.12): 0,451321	0,444225	1,597
	Log.: 0,442335		0,425
0,5	Ritz mit (5.5): 0,690052		12,586
	Ritz mit (5.12): 0,622702	0,612910	1,598
	Log.: 0,610303		0,425
1	Ritz mit (5.5): 0,792662		12,586
	Ritz mit (5.12): 0,715296	0,704049	1,598
	Log.: 0,701054		0,425
2	Ritz mit (5.5): 0,910529		12,586
	Ritz mit (5.12): 0,821660	0,808740	1,597
	Log.: 0,805300		0,425
100	Ritz mit (5.5): 1,991076		12,603
	Ritz mit (5.12): 1,796743	1,768233	1,612
	Log.: 1,760968		0,411

Tabelle 6.4. – Grundzustandsenergie $E_0^{(10)}$ des anharmonischen Potentials $V(x) = gx^{10}$ für verschiedene Werte von g , berechnet mit dem Ritz'schen Variationsverfahren und der logarithmischen Störungstheorie.

g	$E_0^{(10)}$ (Ritz / Log.)	$E_0^{(10)}$ aus [12] / numerisch	relativer Fehler (%)
0,01	Ritz mit (5.5) 0,403342		19,212
	Ritz mit (5.12) 0,347022	0,338339	2,566
	Log 0,338519		0,053
0,1	Ritz mit (5.5) 0,592025		19,215
	Ritz mit (5.12) 0,509359	0,496602	2,569
	Log 0,496879		0,056
0,5	Ritz mit (5.5) 0,774167		19,218
	Ritz mit (5.12) 0,666069	0,649369	2,572
	Log 0,649748		0,058
1	Ritz mit (5.5) 0,868974		19,220
	Ritz mit (5.12) 0,747637	0,728883	2,573
	Log 0,729318		0,060
2	Ritz mit (5.5) 0,975390		19,222
	Ritz mit (5.12) 0,839194	0,818132	2,574
	Log 0,818632		0,061
100	Ritz mit (5.5) 1,872147		19,239
	Ritz mit (5.12) 1,610735	1,570084	2,589
	Log 1,571268		0,075

Teil V. Zusammenfassung

Die Konzepte der Supersymmetrie lassen sich erfolgreich auf die Quantenmechanik anwenden und führen zu interessanten neuen Einsichten.

Um zu einigen dieser Einsichten zu gelangen bzw. um sie zu verstehen, wurde in Teil II zuerst das einfachste SUSY-Modell konstruiert, indem SUSY-Operatoren eingeführt wurden, die bosonische in fermionische Zustände umwandeln und umgekehrt. Da Supersymmetrie bedeutet, dass ein System invariant unter Anwendung eines SUSY-Operators ist, ist es möglich einen supersymmetrischen Hamiltonoperator zu finden. Aus diesem und den SUSY-Operatoren lässt sich die einfachste SUSY-Algebra aufstellen. Am Beispiel des SUSY-Oszillators wurde die typische zweifache Entartung der Zustände mit $E \neq 0$ gezeigt. Falls ein Zustand bei $E = 0$ existiert, ist dieser nicht entartet und man spricht von exakter SUSY. Diese Eigenschaften folgen auch direkt aus der SUSY-Algebra. In Kapitel 2 wurde das einfachste SUSY-Modell auf ein nichtlineares Modell erweitert, welches auch Wechselwirkungen zwischen bosonischen und fermionischen Zuständen zulässt. Die eben beschriebenen Eigenschaften bleiben dabei erhalten. Es wurde gezeigt, dass der supersymmetrische Hamiltonoperator zwei Systeme – ein bosonisches und ein fermionisches – beschreibt und deren Eigenwerte und -funktionen miteinander in Verbindung setzt. Diese beiden Systeme werden durch die sog. Superpartner H_1 und H_2 beschrieben. Die Tatsache, dass H_2 auch einen Superpartner H_3 besitzt, welcher wiederum den Superpartner H_4 besitzt usw., führt zu den SUSY-Ketten. Außerdem wurden das Superpotential und die Riccati-Gleichung eingeführt. Letztere wurde in Teil III störungstheoretisch mit der δ -Entwicklung gelöst, um die Grundzustandsenergien der anharmonischen Potentiale $V(x) = x^{2n}$ mit $n = 2,3,4$ zu bestimmen. Wie gezeigt wurde, liefert diese in der zweiten Ordnung und [1,1] Padé-Approximation keine guten Ergebnisse. Berechnungen höherer Ordnungen sind auf Grund komplizierter Doppel- und Dreifachintegrale schwierig. Das Ritz'sche Variationsverfahren aus der 'gewöhnlichen' Quantenmechanik liefert bei weniger Rechenaufwand wesentlich bessere Ergebnisse. Auch die logarithmische Störungstheorie in Verbindung mit der linearen δ -Entwicklung kann vor allem für die Potentiale $V(x) = x^6$, $V(x) = x^8$ und $V(x) = x^{10}$ überzeugen. Bei der Bestimmung der Energien angeregter Zustände ist die Berechnung hoher Ordnungen mit der δ -Entwicklung ebenfalls schwierig und die Ergebnisse in erster Ordnung können nicht überzeugen. Das in Abs. 5.2 vorgestellte, von Cooper et al. entwickelte und auf den SUSY-Ketten basierende Verfahren liefert für den ersten angeregten Zustand deutlich bessere Ergebnisse.

Literatur

- [1] <http://www.fisica.uniud.it/~giannozz/Corsi/MQ/Software/F90/harmonic1.f90>. Version vom 24.06.2014.
- [2] Carl M. Bender u. a. „Logarithmic approximations to polynomial Lagragians“. In: *Phys. Rev. Lett.* 58 (1987), S. 2615–2618. DOI: [10.1103/PhysRevLett.58.2615](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.58.2615). URL: <http://inspirehep.net/record/250622?ln=de>.
- [3] Carl M. Bender u. a. „Novel perturbative scheme in quantum field theory“. In: *Phys. Rev. D* 37 (6 März 1988), S. 1472–1484. DOI: [10.1103/PhysRevD.37.1472](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.37.1472). URL: <https://inspirehep.net/record/22980?ln=de>.
- [4] I. N. Bronstein u. a. *Taschenbuch der Mathematik*. 7. Aufl. Frankfurt am Main: Verlag Harri Deutsch, 2008. ISBN: 978-3-8171-2007-9.
- [5] F. Cooper, A. Khare und U.P. Sukhatme. *Supersymmetry in Quantum Mechanics*. Singapur/New Jersey/London/Hong Kong: World Scientific Publishing Company, Incorporated, 2001. ISBN: 9789810246051.
- [6] F Cooper und P Roy. δ expansion for the superpotential. Techn. Ber. LA-UR-89-2847. Los Alamos, NM: Los Alamos Nat. Lab., Aug. 1989. URL: <http://inspirehep.net/record/281901?ln=de>.
- [7] Fred Cooper, John Dawson und Harvey Shepard. „SUSY-based variational method for the anharmonic oscillator“. In: *Physics Letters A* 187.2 (1994), S. 140 –144. ISSN: 0375-9601. URL: <http://arxiv.org/abs/patt-sol/9402002>.
- [8] Fred Cooper, Avinash Khare und Uday Sukhatme. „Supersymmetry and quantum mechanics“. In: *Phys.Rept.* 251 (1995), S. 267–385. DOI: [10.1016/0370-1573\(94\)00080-M](https://doi.org/10.1016/0370-1573(94)00080-M). arXiv: [hep-th/9405029 \[hep-th\]](https://arxiv.org/abs/hep-th/9405029). URL: <http://inspirehep.net/record/373454>.
- [9] E.A. Gallegos, A.J. da Silva und D. Spehler. *Some Generalizations in Supersymmetric Quantum Mechanics and the Supersymmetric ε -System Revisited*. 2013. arXiv: [1307.1107 \[hep-th\]](https://arxiv.org/abs/1307.1107). URL: <http://inspirehep.net/record/1241475>.
- [10] Y.A. Gel'fand und E.P. Likhtman. „Extension of the Algebra of Poincare Group Generators and Violation of P invariance“. In: *JETP* 13 (1971), S. 323–326.
- [11] I. S. Gradshteyn und I. M. Ryzhik. *Table of integrals, series, and products*. 7. Aufl. Elsevier/Academic Press, Amsterdam, 2007. ISBN: 978-0-12-373637-6; 0-12-373637-4.
- [12] Peter Babinec Jozef Motycka. *Variational calculations of the spectra of anharmonic oscillators using displaced gaussian functions*. URL: <http://www.gsjournal.net/Science-Journals/Research%20Papers-Quantum%20Theory%20/%20Particle%20Physics/Download/3605>.
- [13] H. Kalka und G. Soff. *Supersymmetrie*. Stuttgart: Teubner, 1997. ISBN: 978-3-519-03238-0. DOI: [10.1007/978-3-322-96701-5](https://doi.org/10.1007/978-3-322-96701-5).
- [14] F Marques, O Negrini und A J da Silva. „A new simple class of superpotentials in SUSY quantum mechanics“. In: *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 45.11 (2012), S. 115307. DOI: [10.1088/1751-8113/45/11/115307](https://doi.org/10.1088/1751-8113/45/11/115307). arXiv: [1111.1198 \[hep-th\]](https://arxiv.org/abs/1111.1198). URL: <http://inspirehep.net/record/944644>.
- [15] G. Münster. *Quantentheorie*. Berlin/New York: de Gruyter, 2010. ISBN: 9783110215281.
- [16] A. Neveu und J.H. Schwarz. „Factorizable dual model of pions“. In: *Nucl.Phys.* B31 (1971), S. 86–112. DOI: [10.1016/0550-3213\(71\)90448-2](https://doi.org/10.1016/0550-3213(71)90448-2).

- [17] Pierre Ramond. „Dual Theory for Free Fermions“. In: *Phys.Rev.* D3 (1971), S. 2415–2418. DOI: [10.1103/PhysRevD.3.2415](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.3.2415).
- [18] Thomas Williams, Colin Kelley und viele andere. *Gnuplot 4.4: an interactive plotting program*. <http://gnuplot.sourceforge.net/>. Feb. 2014.
- [19] Edward Witten. „Dynamical Breaking of Supersymmetry“. In: *Nucl.Phys.* B188 (1981), S. 513. DOI: [10.1016/0550-3213\(81\)90006-7](https://doi.org/10.1016/0550-3213(81)90006-7). URL: <http://inspirehep.net/record/10634>.
- [20] Inc. Wolfram Research. *Mathematica*. Version 9.0. Champaign, Illinois, 2012.

Plagiatserklärung

Hiermit versichere ich, dass die vorliegende Arbeit

Die δ -Entwicklung in der supersymmetrischen Quantenmechanik

selbstständig verfasst worden ist, dass keine anderen Quellen und Hilfsmittel als die angegebenen benutzt worden sind und dass die Stellen der Arbeit, die anderen Werken dem oder Sinn nach entnommen wurden, auf jeden Fall unter Angabe der Quelle als Entlehnung kenntlich gemacht worden sind. Ich erkläre mich mit einem Abgleich der Arbeit mit anderen Texten zwecks Auffindung von Übereinstimmungen sowie mit einer zu diesem Zweck vorzunehmenden Speicherung der Arbeit in eine Datenbank einverstanden.

Ort, Datum

Unterschrift