

## Bachelorarbeit

# Die $\delta$ -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

<b>I. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>II. Supersymmetrische Quantenmechanik</b>	<b>3</b>
<b>1. Bose-Fermi-Supersymmetrie</b>	<b>3</b>
1.1. Das einfachste SUSY Modell . . . . .	3
1.1.1. SUSY-Operatoren . . . . .	5
1.1.2. Der SUSY-Oszillator . . . . .	6
<b>2. Nichtlineare Bose-Fermi-Supersymmetrie</b>	<b>9</b>
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
<b>3. Supersymmetrische Quantenmechanik</b>	<b>15</b>
3.1. Der Hamiltonoperator und sein SUSY-Partner . . . . .	15
3.2. Eigenwerte und -zustände der SUSY-Partner . . . . .	15
3.3. SUSY-Ketten . . . . .	16
<b>III. Die <math>\delta</math>-Entwicklung in der supersymmetrischen Quantenmechanik</b>	<b>19</b>
<b>4. Die <math>\delta</math>-Entwicklung</b>	<b>19</b>
4.1. Abschätzung der Grundzustandsenergie . . . . .	19
4.2. Abschätzung der Energie des ersten angeregten Zustands . . . . .	27
<b>IV. Vergleich der <math>\delta</math>-Entwicklung mit anderen störungstheoretischen Methoden</b>	<b>29</b>
<b>5. Ritz'sches Variationsverfahren</b>	<b>29</b>
5.1. Abschätzung der Grundzustandsenergien anharmonischer Potentiale mit dem Ritz'schen Variationsverfahren . . . . .	29
5.2. Abschätzung der Energien des ersten angeregten Zustands . . . . .	31
<b>6. Die lineare <math>\delta</math>-Entwicklung und logarithmische Störungstheorie</b>	<b>33</b>
6.1. Abschätzung der Grundzustandsenergien anharmonischer Potentiale mit der linearen $\delta$ -Entwicklung und logarithmischer Störungstheorie . . . . .	34
<b>V. Zusammenfassung</b>	<b>41</b>



# 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. Desweiteren können mit Hilfe der SUSY alte Näherungsmethoden verbessert und sogar neue gefunden werden. Eine davon – die  $\delta$ -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  $\delta$ -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  $\delta$ -Entwicklung. Das Ritz'sche Variationsverfahren ist aus der 'gewöhnlichen' Quantenmechanik bekannt und bietet – wie die  $\delta$ -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  $\delta$ -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

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

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  $2 \times 2$  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

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

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

$$Q_\pm^2 = 0 \quad (1.17)$$

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

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

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 hermiteschen 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

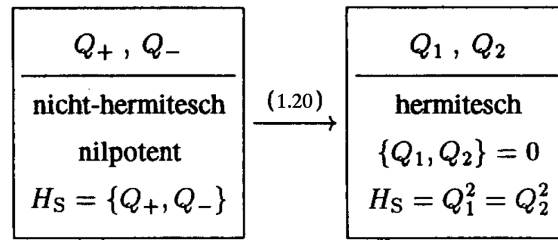
$$H_S = Q_1^2 = Q_2^2, \quad (1.23)$$

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-Oszillator – betrachtet werden, dessen Eigenwertspektrum diese zwei Eigenschaften schon offenbart.

### 1.1.2. Der SUSY-Oszillator

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-Oszillator:** Zu einem Bose-Oszillator gehört der Hamiltonoperator

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

wobei  $m$  die Masse,  $\omega_B$  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

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

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 Energieeigenwerte  $E_{n_B}$  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  $\psi$  und  $\xi$  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  $\psi$  bzw.  $\xi$  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  $\{f^\dagger, f\} = \mathbb{1}$  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 Energieeigenwerte

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

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

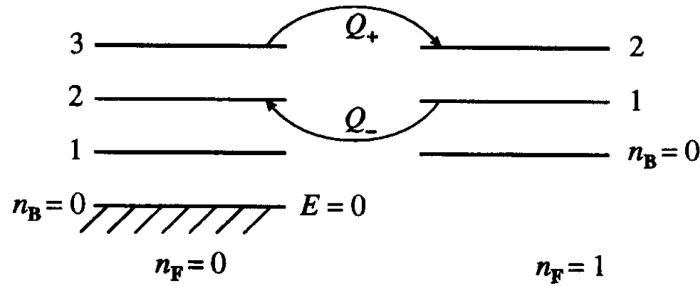
$$E = \hbar\omega(n_B + n_F). \quad (1.40)$$

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 Energieeigenwerte 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

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

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 sogenannte **reine** oder **kanonische Darstellung** - der Art

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

nahe. Alle Operatoren sind in dieser Darstellung  $2 \times 2$  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 Antikommutatoren 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**  $W(Q)$ <sup>1</sup> 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  $[\text{Energie}]^{1/2}$  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

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

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

<sup>1</sup>Häufig 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 Schrödingergleichung, 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

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

gegeben sind. Eine Lösung für die Grundzustandswellenfunktion ist jedoch nur physikalisch sinnvoll, wenn sie normierbar ist. Anders ausgedrückt heißt das, die Grundzustandswellenfunktion muss quadratintegrabel 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 Fälle 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 gebrochene SUSY wird in Abs. 2.5 näher betrachtet.

Gleichung (2.21) besagt, dass bei exakter SUSY aus dem Superpotential  $W$  sofort die Grundzustandswellenfunktion  $\Psi_0^-$  zu  $H_-$  folgt. Es folgt aber auch aus der Grundzustandswellenfunktion  $\Psi_0^-$  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  $\Psi_0^-$  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  $\Psi_0^-$  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

$$W(x) = g \cdot x^n \tag{2.32}$$

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

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

definiert ist, wobei  $\varepsilon(x)$  die Signumfunktion ist. Sie führt dazu, dass die Supersymmetrie für alle  $n$  erhalten ist. Mit Hilfe des  $\varepsilon$ -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  $\Psi_0^-$ . 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 weiteren 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 Energieeigenwerte. Nur der Grundzustand von  $H_-$  bei  $E = 0$  bildet eine Ausnahme. Die Beziehung zwischen den Energieeigenwerten 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 Eigenwerte 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. Desweiteren 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

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

$H_1$  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

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

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:

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

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

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



# Teil III. Die $\delta$ -Entwicklung in der supersymmetrischen Quantenmechanik

## 4. Die $\delta$ -Entwicklung

Die  $\delta$ -Entwicklung ist eine wichtige Näherungsmethode, die aus der Quantenfeldtheorie stammt und auf der Einführung eines Störungsparameters  $\delta$  beruht. Es handelt sich bei der  $\delta$ -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  $\delta$ -Entwicklung die Grundzustandsenergie  $E_0 = E_0(\delta)$  dieses nicht exakt lösbaren Potentials als Funktion von  $\delta$  abgeschätzt werden.

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

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

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

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

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

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

bietet die  $\delta$ -Entwicklung eine Alternative zum Ritz'schen Variationsverfahren oder anderen Verfahren, um die Grundzustandsenergien anharmonischer Potentiale abzuschätzen. Der Parameter  $\delta$  gibt dabei die Anharmonizität des Potentials an. Die  $\delta$ -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  $\delta$ -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  $\delta$ . Dazu geht man davon aus, dass sowohl die Grundzustandsenergie  $E_0$  als auch das Superpotential  $W(x)$  in Potenzreihen nach  $\delta$  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

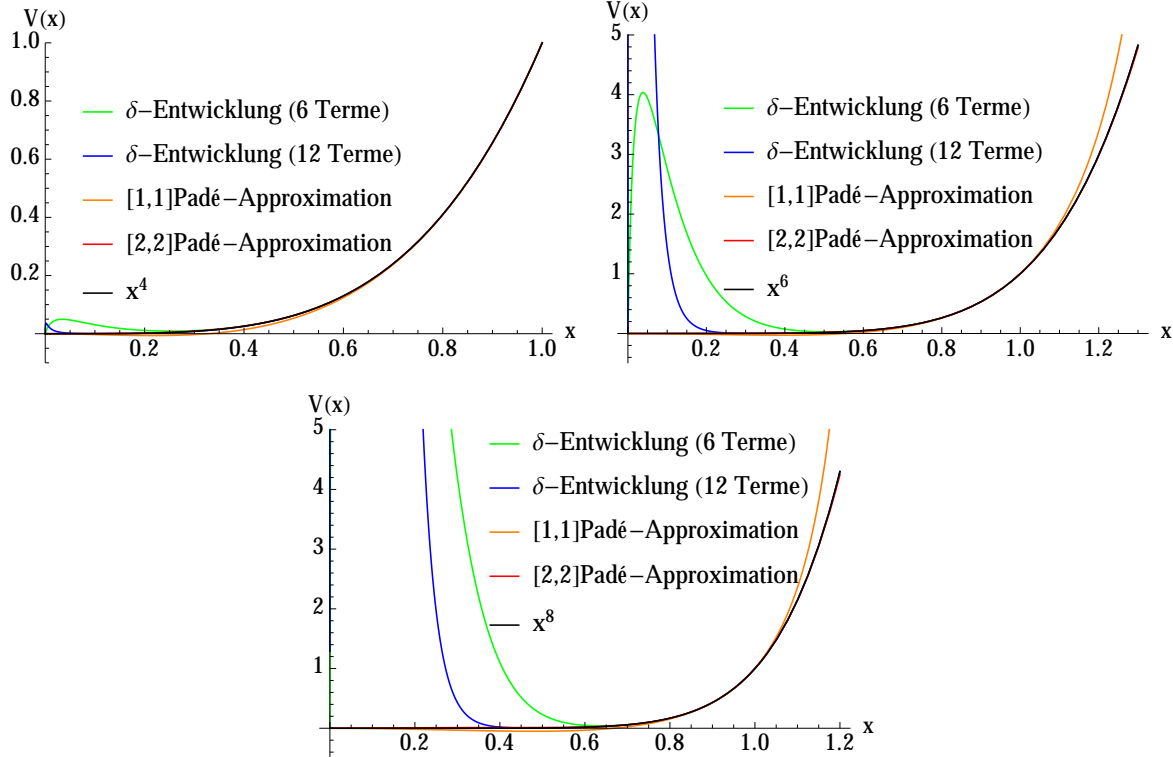
$$V(x) = \frac{1}{2} M^2 x^2 M^{\delta} x^{2\delta} = \frac{1}{2} M^2 x^2 e^{\delta \ln M x^2} = \frac{1}{2} M^2 x^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\delta^n}{n!} (\ln M x^2)^n. \quad (4.5)$$

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  $\delta$  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 Oszillator 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

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

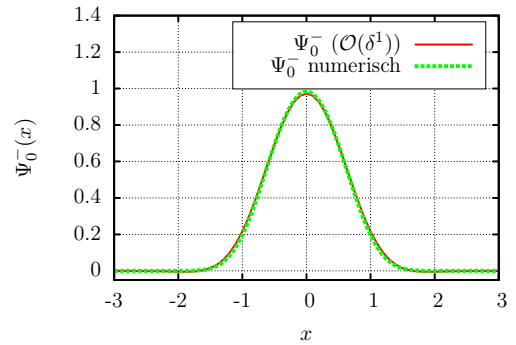
liefert. Durch die Substitution  $t = \sqrt{M} y$  lässt sich (4.12) auf ein aus [4, 11] bekanntes Integral bringen und man erhält

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

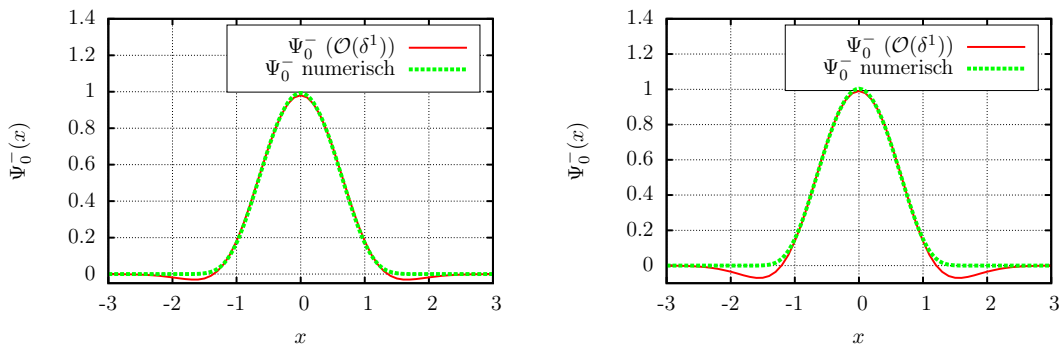
mit der Euler-Konstanten  $\gamma \simeq 0,577\,216$ . Der Ausdruck (4.13) lässt sich auch durch die Digammafunktion  $\Psi(x) = \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)}$  ausdrücken [11]:

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

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  $\Psi(x) = (a - bx^2)e^{-cx^2}$  gefittet. 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 verwendet<sup>1</sup>. 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.

<sup>1</sup>Das 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  $e_2 \approx 0,038\,213$ . 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

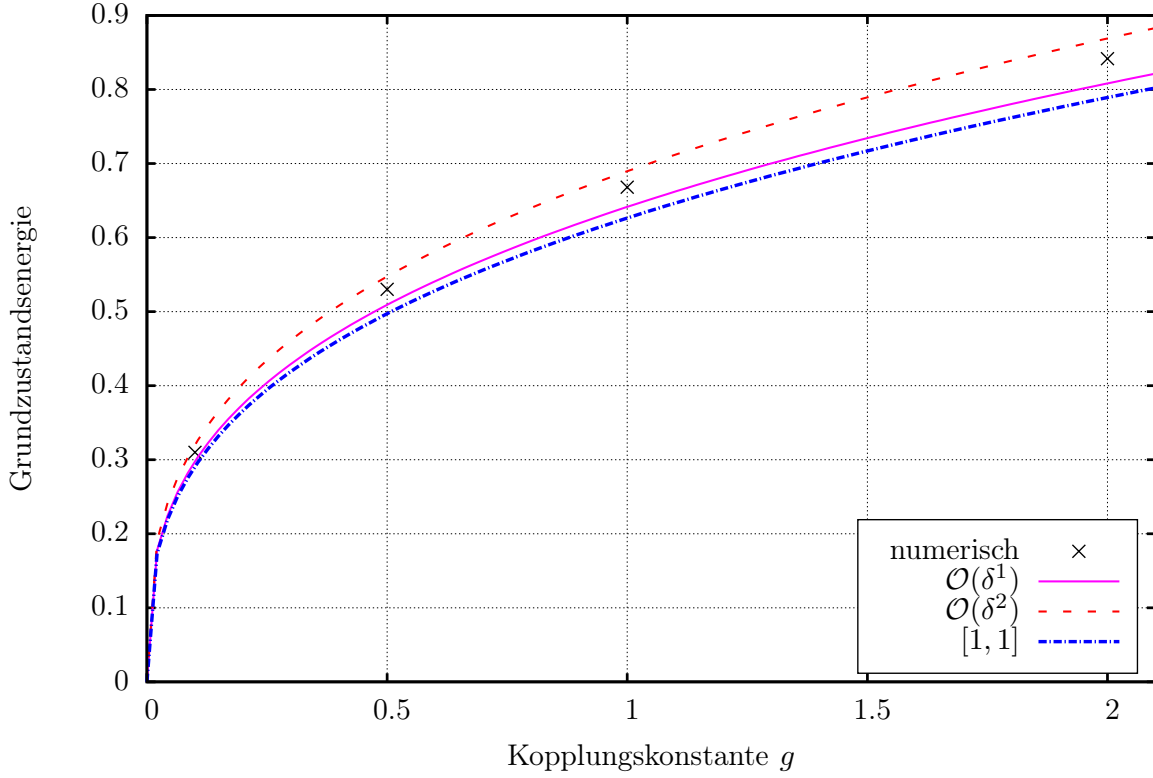
$$E_0 = e_0 + \delta e_1 + \delta^2 e_2 + \mathcal{O}(\delta^3) = M \left[ \frac{1}{2} + \delta \frac{1}{4} \Psi\left(\frac{3}{2}\right) + \delta^2 \frac{1}{128} \left\{ -\Psi''\left(\frac{3}{2}\right) - 8\Psi'\left(\frac{3}{2}\right) \ln(2) + 8\Psi^2\left(\frac{3}{2}\right) - 16\Psi\left(\frac{3}{2}\right)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

Mit den Werten für  $\delta$  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.

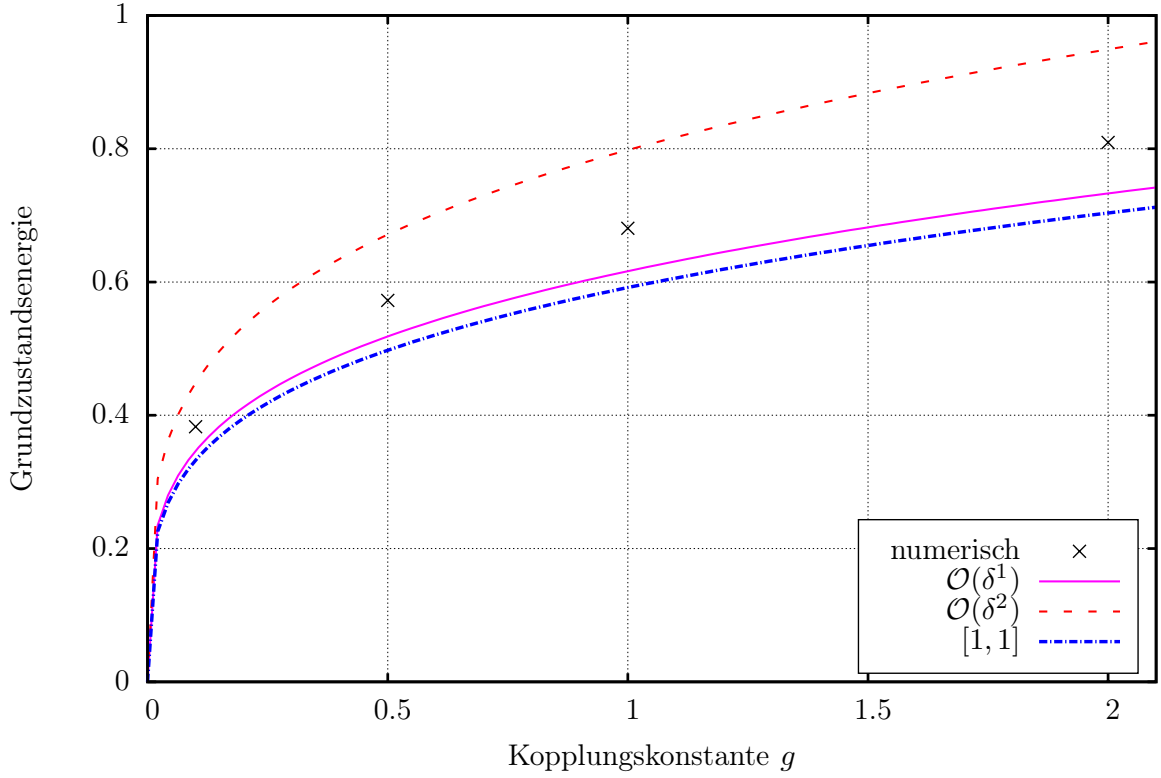
Man sieht, dass nur für das Potential  $V(x) = x^4$  das Ergebnis in zweiter Ordnung genauer ist als das Ergebnis in erster Ordnung. Der relative Fehler zum numerischen Wert beträgt hier jedoch schon über 3 %. Für die beiden anderen Potentiale  $x^6$  und  $x^8$  ist der Wert aus der ersten Ordnung genauer 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 lieferten 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  $\delta$ -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.

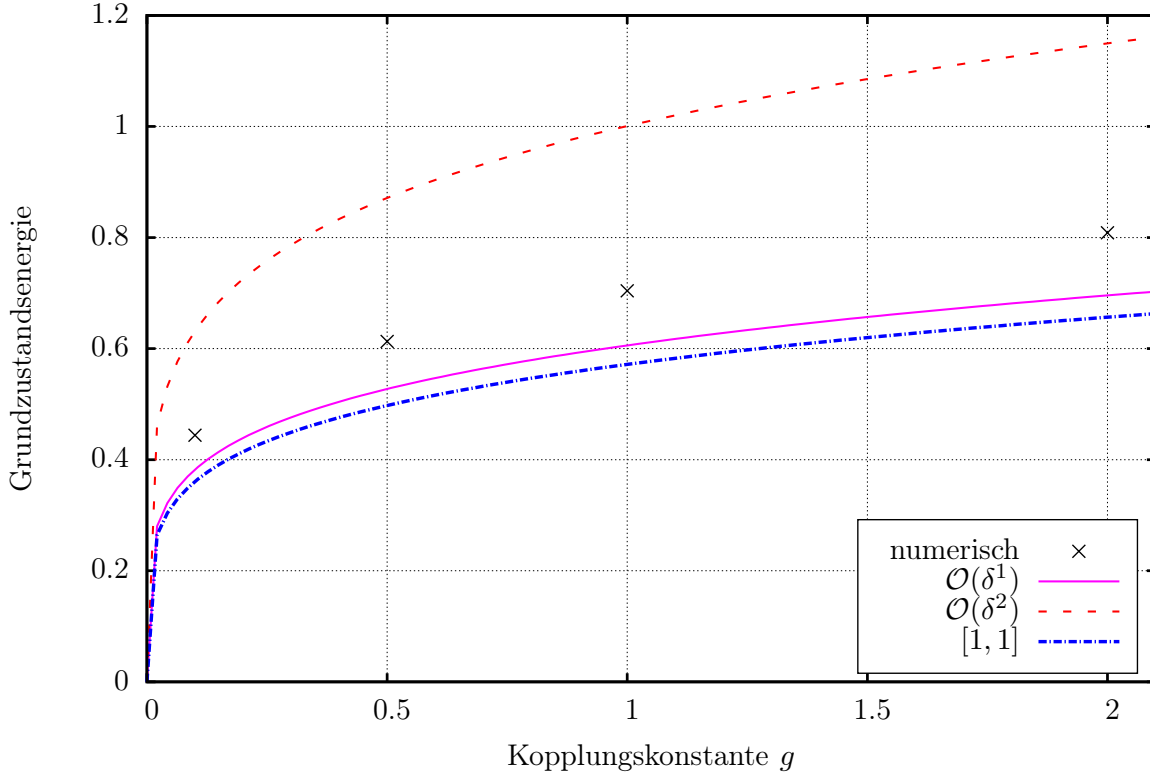
$g$	$E_0^{(4)}$ ( $\delta$ -Entwicklung)	$E_0^{(4)}$ aus [12] / numerisch	relativer Fehler (%)
0,01	$\mathcal{O}(\delta^1)$ : 0,138197	0,143913	3,972
	$\mathcal{O}(\delta^2)$ : 0,148570		3,236
	[1,1]: 0,134944		6,232
0,1	$\mathcal{O}(\delta^1)$ : 0,297737	0,310052	3,972
	$\mathcal{O}(\delta^2)$ : 0,320084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

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

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

$V(x)$	$g$	$E_1^-$ ( $\delta$ -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 $\delta$ -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  $\Psi$  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  $\alpha_i$  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  $E_V^{(n)}$ :

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

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

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

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

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) lösbare 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  $\alpha_1$  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  $\alpha_2$  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  $\delta$ -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 Funktional

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

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

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

Die Minimierung nach  $\alpha$  kann analytisch durchgeführt werden, die Minimierung nach  $\beta$  erfolgt dann numerisch. Mit den Werten für  $a$  und  $b$  aus dem letzten Abschnitt können 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  $\delta$ -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  $\Delta E$  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	$\Delta E$		$E_1^-$	$E_1^-$ numerisch	relativer Fehler (%)
$gx^4$	0,01	0,372196	→	0,516399	0,515696	0,136
	1	1,727582	→	2,393554	2,393702	0,006
	100	8,018727	→	11,125484	11,113243	0,110
$gx^6$	0,01	0,598415	→	0,815342	0,815791	0,055
	1	1,892354	→	2,578338	2,579820	0,057
	100	5,984149	→	8,153422	8,159630	0,076
$gx^8$	0,01	0,797435	→	1,082200	1,087442	0,482
	1	2,003067	→	2,718363	2,731554	0,483
	100	5,031476	→	6,828219	6,862160	0,495
$gx^{10}$	0,01	0,968027	→	1,315049	1,327988	0,974
	1	2,085551	→	2,833188	2,861092	0,975
	100	4,493184	→	6,103919	6,164544	0,983

## 6. Die lineare $\delta$ -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  $\Psi_0$ , um Energiekorrekturen beliebiger Ordnung zu berechnen, wie nun gezeigt wird.

Man startet mit der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

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

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

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

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

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

Für  $\Psi(x)$  wählt man den Ansatz

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

setzt diesen in (6.3) ein und erhält somit

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

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

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

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

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

$$S_0''(x) + S_0'^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \left( V_0(x) - e_0 \right) \quad (6.8a)$$

$$S_1''(x) + 2S_0'(x)S_1'(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \left( V_1(x) - e_1 \right) \quad (6.8b)$$

$$S_2''(x) + 2S_0'(x)S_2'(x) + S_1'^2(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} e_2 \quad (6.8c)$$

$\vdots$

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

$$\left(S'_2(x)e^{2S_0(x)}\right)' = - \left(\frac{2m}{\hbar^2} e_2 + S_1'^2(x)\right) e^{2S_0(x)} \quad (6.11)$$

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

$$e_2 = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} S_1'^2(x) \Psi_0^2(x) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0^2(x) dx} = - \frac{\hbar^2}{m} \frac{\int_0^{\infty} S_1'^2(x) \Psi_0^2(x) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0^2(x) dx}. \quad (6.12)$$

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 $\delta$ -Entwicklung und logarithmischer Störungstheorie

Marques et al. zeigten in [14], dass mit Hilfe der logarithmischen Störungstheorie und des in Abs. 2.5 vorgestellten  $\varepsilon$ -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  $\Psi_0^-$  von  $V_-$  die Energie  $E_0^- = 0$  und  $\Psi_0^-$  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  $\delta = 1/2$ <sup>1</sup> 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

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

<sup>1</sup>Für  $\delta = 1$  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

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

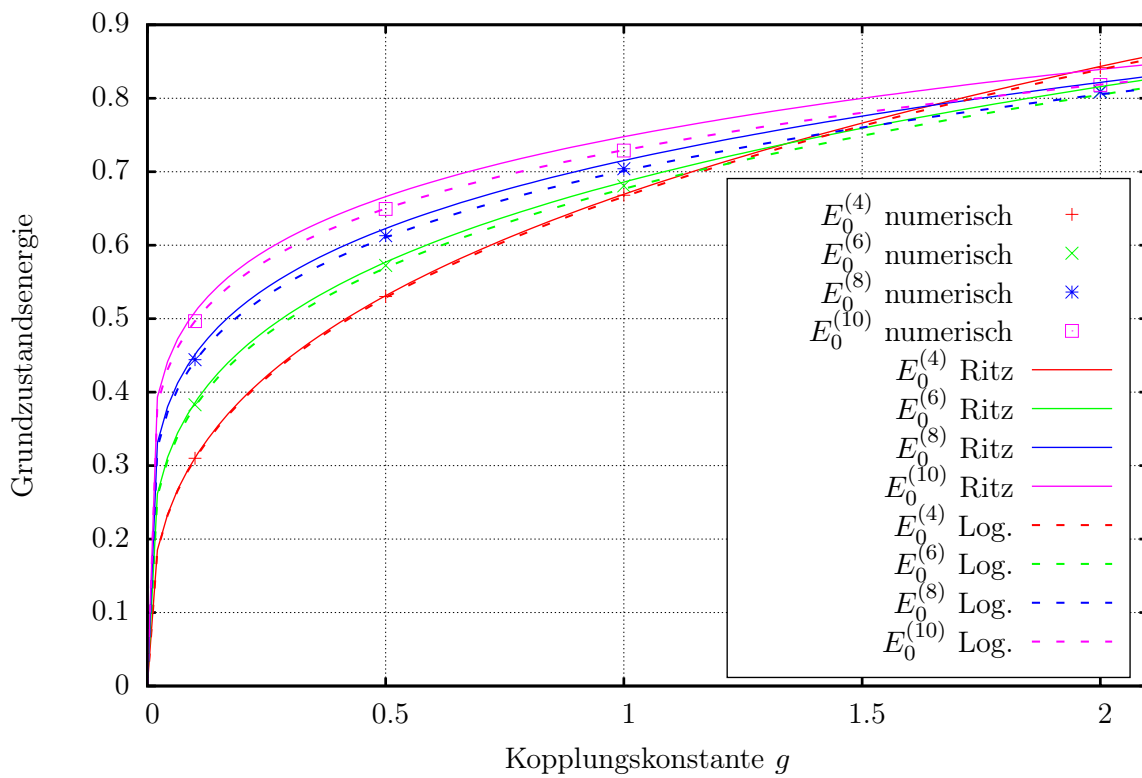
allerdings lässt sich für  $e_2$  kein geschlossener Ausdruck angeben. Der numerische Wert lautet  $e_2 \approx -2,949\,764$  und führt zu einem Wert der Grundzustandsenergie von  $E_0^{(10)} \approx 0,446\,245$ , der sich mit Hilfe der  $[1,1]$  Padé-Approximation zu

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

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	0,201
	Log.:	0,143479	0,302
0,1	Ritz mit (5.5):	0,316287	2,011
	Ritz mit (5.12):	0,310676	0,201
	Log.:	0,309117	0,302
0,5	Ritz mit (5.5):	0,540844	2,011
	Ritz mit (5.12):	0,531248	0,201
	Log.:	0,528582	0,302
1	Ritz mit (5.5):	0,681420	2,011
	Ritz mit (5.12):	0,669330	0,201
	Log.:	0,665972	0,302
2	Ritz mit (5.5):	0,858536	2,011
	Ritz mit (5.12):	0,843304	0,201
	Log.:	0,839072	0,302
100	Ritz mit (5.5):	3,162872	2,003
	Ritz mit (5.12):	3,106757	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	0,776
	Log.:	0,214003	0,582
0,1	Ritz mit (5.5):	0,408248	6,651
	Ritz mit (5.12):	0,385757	0,776
	Log.:	0,380557	0,583
0,5	Ritz mit (5.5):	0,610474	6,651
	Ritz mit (5.12):	0,576842	0,776
	Log.:	0,569066	0,583
1	Ritz mit (5.5):	0,725980	6,651
	Ritz mit (5.12):	0,685984	0,776
	Log.:	0,676737	0,583
2	Ritz mit (5.5):	0,863340	6,651
	Ritz mit (5.12):	0,815778	0,776
	Log.:	0,804781	0,583
100	Ritz mit (5.5):	2,295749	6,663
	Ritz mit (5.12):	2,169273	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	1,599
	Log.:	0,279095	0,424
0,1	Ritz mit (5.5):	0,500136	12,586
	Ritz mit (5.12):	0,451321	1,597
	Log.:	0,442335	0,425
0,5	Ritz mit (5.5):	0,690052	12,586
	Ritz mit (5.12):	0,622702	1,598
	Log.:	0,610303	0,425
1	Ritz mit (5.5):	0,792662	12,586
	Ritz mit (5.12):	0,715296	1,598
	Log.:	0,701054	0,425
2	Ritz mit (5.5):	0,910529	12,586
	Ritz mit (5.12):	0,821660	1,597
	Log.:	0,805300	0,425
100	Ritz mit (5.5):	1,991076	12,603
	Ritz mit (5.12):	1,796743	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	2,566
	Log	0,338519	0,053
0,1	Ritz mit (5.5)	0,592025	19,215
	Ritz mit (5.12)	0,509359	2,569
	Log	0,496879	0,056
0,5	Ritz mit (5.5)	0,774167	19,218
	Ritz mit (5.12)	0,666069	2,572
	Log	0,649748	0,058
1	Ritz mit (5.5)	0,868974	19,220
	Ritz mit (5.12)	0,747637	2,573
	Log	0,729318	0,060
2	Ritz mit (5.5)	0,975390	19,222
	Ritz mit (5.12)	0,839194	2,574
	Log	0,818632	0,061
100	Ritz mit (5.5)	1,872147	19,239
	Ritz mit (5.12)	1,610735	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  $\delta$ -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  $\delta$ -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  $\delta$ -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 Lagrangians“. 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.  *$\delta$  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](https://arxiv.org/abs/hep-th/9405029) [hep-th]. 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  $\epsilon$ -System Revisited*. 2013. arXiv: [1307.1107](https://arxiv.org/abs/1307.1107) [hep-th]. 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](https://arxiv.org/abs/1111.1198) [hep-th]. 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 $\delta$ -Entwicklung in der supersymmetrischen Quantenmechanik**

selbständig 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