

Bachelorarbeit Physik

Anwendungen des Rayleigh-Ritz-Verfahrens unter
Ausnutzung der Supersymmetrie

Autor: Thorsten Schimannek
Matrikel Nr.: 367144
Erstgutachter: Prof. Dr. Klasen
Zweitgutachter: Prof. Dr. Münster

eingereicht am 24. Mai 2012

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	1
2.1	Supersymmetrische Quantenmechanik	1
2.1.1	Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren	2
2.1.2	Die SUSY-Transformation	3
2.1.3	Der harmonische Oszillator	5
2.1.4	Der fermionische Oszillator	5
2.1.5	Der SUSY-Oszillator	6
2.2	Nichtlineare SUSYQM	7
2.2.1	Kanonische Darstellung	8
2.2.2	Das Superpotential	9
2.2.3	Superpotential und Grundzustand	9
2.2.4	Eigenwerte und -zustände von H_1 und H_2	11
2.3	Variationsrechnung	12
3	Der Anharmonische Oszillator	13
3.1	Das rein anharmonische System	14
3.1.1	Numerische Lösung mit Schießverfahren	15
3.1.2	Ritzsche Variation und SUSYQM	15
3.1.3	Variation nach Knotenverfahren	19
3.2	Das biquadratische System	22
4	Zusammenfassung	24

1 Einleitung

Sowohl in der klassischen als auch in der Quantenmechanik lässt sich nur eine begrenzte Klasse an Problemen analytisch exakt lösen. Die Entwicklung zuverlässiger Näherungsverfahren ist daher notwendig, um die Theorie auf allgemeinere Systeme, wie sie in der Natur vorwiegend auftreten, anwenden zu können. Ein wichtiges Hilfsmittel der Quantenmechanik und insbesondere der Quantenchemie [1] stellt das Rayleigh-Ritz-Verfahren dar, welches die näherungsweise Berechnung von Grundzustandsenergien und in einigen Fällen auch der Energien angeregter Zustände erlaubt. Unabhängig davon hat sich aus der Forschung zu quantenfeldtheoretischen Ansätzen jenseits des Standardmodells mit der supersymmetrischen Quantenmechanik ein neuer Blickwinkel eröffnet, welcher weitreichende Verknüpfungen zwischen scheinbar unzusammenhängenden Systemen offenlegt. Es hat seit der Entwicklung durch H. Nicolai [2] und E. Witten [3] viele Bestrebungen gegeben, diese Erkenntnisse zur Verbesserung bekannter Approximationsverfahren nutzbar zu machen. Ich möchte in dieser Arbeit insbesondere zwei Methoden zur Erweiterung des Rayleigh-Ritz-Verfahrens darstellen, welche von Cooper et al. [4] und Mukharjee et al. [1] entwickelt wurden, und deren Anwendung am anharmonischen Oszillator durchführen.

2 Grundlagen

2.1 Supersymmetrische Quantenmechanik

Beginnend in den siebziger Jahren des letzten Jahrhunderts wurde die Theorie einer neuen, fundamentalen Symmetrie der Natur, der Supersymmetrie, entwickelt. Die Symmetrie herrscht dabei zwischen Bosonen und Fermionen, wobei zu jedem Teilchen des Standardmodells ein neues Teilchen, der sogenannte Superpartner, postuliert wird. Bei exakter Supersymmetrie sollten sich die Teilchen also, unter Berücksichtigung der übrigen Erhaltungssätze, ohne Energieaufwand in ihre Superpartner umwandeln lassen. Bisher konnte allerdings keines dieser SUSY-Teilchen beobachtet werden. Sofern die Supersymmetrie in der Natur realisiert ist, muss sie demnach gebrochen sein. Die genaue Methode der Brechung ist derzeit Gegenstand intensiver Forschung und könnte letztendlich wohl nur mit der Beobachtung der Superpartner eindeutig identifiziert werden. Schon 1976 übertrug H. Nicolai den Formalismus auf nicht-relativistische Spin-Systeme [2]. und E. Witten nutzte 1981 eine Erweiterung dieser SUSY-Quantenmechanik (SUSYQM) zum Studium der Symmetriebre-

chung [3]. Davon ausgehend hat sich die SUSYQM zu einem eigenen Gegenstand der Forschung entwickelt, aus dem sich, unabhängig von Erfolg oder Mißerfolg der supersymmetrischen Feldtheorie, elegante Methoden zum Umgang mit klassischen quantenmechanischen Problemen ergeben. In der folgenden Einführung folge ich im wesentlichen der ausführlichen Darstellung von Kalka und Soff [5].

2.1.1 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

In der Feldtheorie lassen sich die Teilchen nach ihrem Spin in Bosonen und Fermionen einordnen. Dieser lässt sich zwar durch die Konstruktion eines entsprechenden Hamiltonoperators und Verwendung des Spinorformalismus in die Schrödingergleichung integrieren, bleibt aber dennoch eine extrinsische Größe. Man verwendet zur Klassifizierung der Systeme daher nicht den Spin, sondern die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren in der Besetzungszahldarstellung

$$|\Psi\rangle = |n_1, \dots, n_i\rangle. \quad (1)$$

Handelt es sich um bosonische Teilchen, so können die Besetzungszahlen beliebige Werte aus den natürlichen Zahlen annehmen. Wir definieren die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$\hat{b}_k^+ |n_1, \dots, n_k, \dots, n_i\rangle = \sqrt{n_k + 1} |n_1, \dots, n_k + 1, \dots, n_i\rangle \quad (2)$$

und

$$\hat{b}_k^- |n_1, \dots, n_k, \dots, n_i\rangle = \sqrt{n_k} |n_1, \dots, n_k - 1, \dots, n_i\rangle. \quad (3)$$

Daraus ergibt sich unmittelbar der Besetzungszahloperator

$$\hat{n}_k |n_1, \dots, n_k, \dots, n_i\rangle = \hat{b}_k^+ \hat{b}_k^- |n_1, \dots, n_k, \dots, n_i\rangle = n_k |n_1, \dots, n_k, \dots, n_i\rangle. \quad (4)$$

Durch Einsetzen folgen außerdem die Kommutatoren

$$[\hat{b}_k^-, \hat{b}_{k'}^+] = \delta_{k,k'} \quad (5)$$

und

$$[\hat{b}_k^-, \hat{b}_{k'}^-] = [\hat{b}_k^+, \hat{b}_{k'}^+] = 0. \quad (6)$$

Für fermionische Teilchen lassen sich analoge Operatoren definieren. Zusätzlich ist allerdings das Pauli-Prinzip zu berücksichtigen, nach dem ein Zustand nicht von mehreren Fermionen gleichzeitig besetzt werden kann. Damit folgt für die Erzeuger und Vernichter

$$\hat{f}_k^+ |n_1, \dots, n_k, \dots, n_i\rangle = \delta_{n_k,0} |n_1, \dots, 1, \dots, n_i\rangle \quad (7)$$

sowie

$$\hat{f}_k^- |n_1, \dots, n_k, \dots, n_i\rangle = \delta_{n_k,1} |n_1, \dots, 0, \dots, n_i\rangle. \quad (8)$$

Daraus lässt sich wieder der Besetzungszahloperator

$$\hat{n}_k |n_1, \dots, n_k, \dots, n_i\rangle = \hat{f}_k^+ \hat{f}_k^- |n_1, \dots, n_k, \dots, n_i\rangle = n_k |n_1, \dots, n_k, \dots, n_i\rangle \quad (9)$$

konstruieren. Das Eigenwertspektrum reduziert sich offensichtlich auf die Werte 1 und 0. Aus der zusätzlichen Einschränkung durch das Pauli-Prinzip ergeben sich jetzt, statt der bosonischen Kommutatoren, Antikommutatorrelationen der fermionischen Erzeuger und Vernichter. Durch Einsetzen zeigt sich

$$\{\hat{f}_k^-, \hat{f}_{k'}^+\} = \delta_{k,k'} \quad (10)$$

sowie

$$\{\hat{f}_k^-, \hat{f}_{k'}^-\} = \{\hat{f}_k^+, \hat{f}_{k'}^+\} = 0. \quad (11)$$

2.1.2 Die SUSY-Transformation

Zu einem supersymmetrischen Modell gehören nun wenigstens Transformationen, welche Teilchen unterschiedlicher Statistik ineinander umwandeln, sowie ein dagegen invarianter Hamiltonoperator. Wir beschränken uns zunächst auf ein System mit einem bosonischen und einem fermionischen Zustand $|\Psi\rangle = |n_b, n_f\rangle$ und suchen Operatoren

$$\hat{Q}_+ |n_b, n_f\rangle \propto \delta_{n_f,0} |n_b - 1, n_f + 1\rangle \quad (12)$$

sowie

$$\hat{Q}_- |n_b, n_f\rangle \propto \delta_{n_f,1} |n_b + 1, n_f - 1\rangle. \quad (13)$$

Aus den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren lassen sich auf einfache Weise Operatoren konstruieren, welche eine solche Umwandlung vornehmen. Wir werden

$$\hat{Q}_+ = \hat{b}^- \hat{f}^+ \quad (14)$$

und

$$\hat{Q}_- = \hat{b}^+ \hat{f}_- \quad (15)$$

im folgenden als SUSY-Operatoren bezeichnen. Von den fermionischen Erzeugern und Vernichter erben sie die sogenannte Nilpotenz,

$$\hat{Q}_+^2 = \hat{Q}_-^2 = 0. \quad (16)$$

Der Vorfaktor ist zunächst willkürlich auf eins gesetzt und kann im Prinzip jeden beliebigen Wert annehmen, solange er bei beiden Operatoren identisch gewählt wird. Supersymmetrie bedeutet nun das Kommutieren der SUSY-Operatoren mit dem Hamiltonoperator

$$[\hat{H}, \hat{Q}_+] = [\hat{H}, \hat{Q}_-] = 0. \quad (17)$$

Ein einfacher Ansatz für den Hamiltonoperator, welcher diese Bedingung erfüllt, lautet

$$\hat{H}_S = \{ \hat{Q}_+, \hat{Q}_- \}. \quad (18)$$

Da die SUSY-Operatoren selbst nicht hermitesch sind, bietet es sich an, die Operatoren

$$\hat{Q}_1 = \hat{Q}_- + \hat{Q}_+ \quad (19)$$

und

$$\hat{Q}_2 = i (\hat{Q}_- - \hat{Q}_+) \quad (20)$$

zu definieren. Es gilt dann

$$\hat{Q}_1 |n_b, 0\rangle \propto |n_b - 1, 1\rangle \quad (21)$$

sowie

$$\hat{Q}_1 |n_b, 1\rangle \propto |n_b + 1, 0\rangle. \quad (22)$$

Diese bieten neben ihrer Hermitizität den Vorteil, dass sie einen Zustand bei zweimaliger Anwendung wieder in sich selbst überführen. Wir werden sie im folgenden als SUSY-Generatoren bezeichnen. Sie sind im Gegensatz zu den SUSY-Operatoren nicht nilpotent, genügen aber der Antikommutatorrelation

$$\{ \hat{Q}_1, \hat{Q}_2 \} = 0. \quad (23)$$

Durch Einsetzen in den zuvor gewählten Ansatz (18) erhalten wir die Darstellung des Hamiltonoperators

$$\hat{H}_S = \hat{Q}_1^2 = \hat{Q}_2^2. \quad (24)$$

Dieser kommutiert also auch mit den SUSY-Generatoren.

2.1.3 Der harmonische Oszillator

Der harmonische Oszillator mit dem Hamiltonoperator

$$\hat{H}_B = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2, \quad (25)$$

ist ein Standardmodell der Quantenmechanik und wird in praktisch jeder Einführung des Themas eingehend untersucht. Er lässt sich algebraisch mit Hilfe der Auf- und Absteigeoperatoren

$$\hat{b}^\pm = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} \mp \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) \quad (26)$$

lösen, welche den Kommutatorrelationen

$$[\hat{b}^-, \hat{b}^+] = 1 \quad (27)$$

und

$$[\hat{b}^-, \hat{b}^-] = [\hat{b}^+, \hat{b}^+] = 0 \quad (28)$$

genügen. Mit der Definition $\hat{n}_b = \hat{b}^+\hat{b}^-$ lässt sich der Hamiltonoperator dann umschreiben zu

$$\hat{H}_B = \hbar\omega (\hat{n}_b + 1/2). \quad (29)$$

Offensichtlich lassen sich die Auf- und Absteigeoperatoren auch als Erzeuger und Vernichter von Bosonen in einem Zustand auffassen. Jedes Boson besitzt dabei eine Energie von $\hbar\omega$, und die Energie des Gesamtsystems mit der Bosonenzahl n_b beträgt

$$E_b = \hbar\omega (n_b + 1/2). \quad (30)$$

2.1.4 Der fermionische Oszillator

Es lässt sich auch ein fermionisches Pendant konstruieren. Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$\hat{f}^\pm = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\psi \mp i\pi) \quad (31)$$

sollen jetzt den Antikommutatorrelationen (10) und (11) genügen. Für die Fermionischen Orts- und Impulsoperatoren $\hat{\psi}$ und $\hat{\pi}$ folgen dann die Darstellungen

$$\hat{\psi} = \sqrt{\frac{\hbar}{2}} (\hat{f}^+ + \hat{f}^-) \quad (32)$$

und

$$\hat{\pi} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} (\hat{f}^+ - \hat{f}^-) \quad (33)$$

sowie die Antikommutatoren

$$\{\psi, \pi\} = 0 \quad (34)$$

und

$$\{\psi, \psi\} = \{\pi, \pi\} = \hbar. \quad (35)$$

Der einfache Ansatz für einen Hamiltonoperator

$$\hat{H}_F = i\omega\hat{\psi}\hat{\pi} \quad (36)$$

führt schließlich auf die Darstellung

$$\hat{H}_F = \hbar\omega (\hat{f}^+ \hat{f}^- - 1/2) = \hbar\omega (\hat{n}_f - 1/2) \quad (37)$$

mit $n_f = \hat{f}^+ \hat{f}^-$. Diese besitzt ausreichend Ähnlichkeit mit dem Ergebnis des harmonischen Oszillators, um hier guten Gewissens von einem fermionischen Oszillator sprechen zu können. Wichtig ist festzustellen, dass die Grundzustandsenergie nun den negativen Wert $-\hbar\omega$ besitzt. Insgesamt hat sich das Eigenwertspektrum auf die Energien

$$E_f = \pm \frac{\hbar\omega}{2} \quad (38)$$

reduziert. Der fermionische Oszillator beschreibt also ein Zwei-Zustands-System, wie es z.B. vom Zeeman-Effekt bekannt ist.

2.1.5 Der SUSY-Oszillator

Dass der harmonische und fermionische Oszillator die Grundlage des einfachsten supersymmetrischen Modells bilden, zeigt sich, indem wir den Vorfaktor der beiden SUSY-Operatoren zu $\sqrt{\hbar\omega}$ setzen:

$$\hat{Q}_+ = \sqrt{\hbar\omega} \hat{b}^- \hat{f}^+ \quad \hat{Q}_- = \sqrt{\hbar\omega} \hat{b}^+ \hat{f}^- \quad (39)$$

Für den SUSY-Hamiltonoperator folgt dann

$$\hat{H}_S = \{\hat{Q}_+, \hat{Q}_-\} = \hbar\omega (\hat{b}^+\hat{b}^- + \hat{f}^+\hat{f}^-) = \hbar\omega (\hat{n}_b + \hat{n}_f) = \hat{H}_b + \hat{H}_f. \quad (40)$$

Die einfachen Ansätze aus 2.1.2 führen offensichtlich direkt auf die Summe der Hamiltonoperatoren der beiden Oszillatoren. Wir bezeichnen das so gewonnene System als SUSY-Oszillator. In Abbildung 1 sind die niedrigsten Energieniveaus dargestellt. Wir werden Zustände mit $n_f = 0$ im folgenden als bosonische und solche

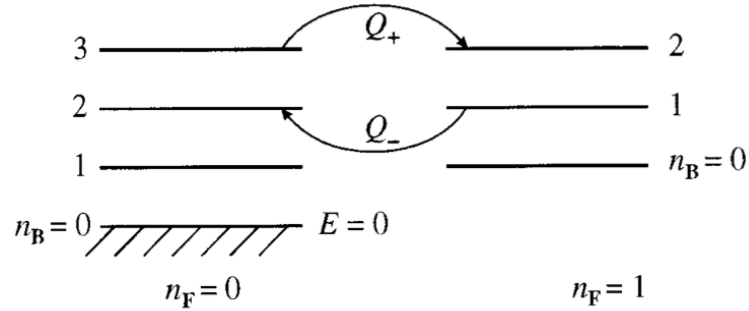


Abbildung 1: Die niedrigsten Energieniveaus des SUSY-Oszillators. Kalka, Soff - *Supersymmetrie*, Teubner 1997

mit $n_f = 1$ als fermionische Zustände bezeichnen. Offensichtlich sind alle Zustände mit der Energie $E_{n_b, n_f} > 0$ zweifach entartet und es gilt $E_{n_b, 1} = E_{n_b+1, 0}$. Die SUSY-Transformationen wandeln also, wie erwartet, bosonische und fermionische Zustände gleicher Energie ineinander um.

2.2 Nichtlineare SUSYQM

Der Ansatz für die SUSY-Operatoren lässt sich verallgemeinern, indem statt der bosonischen Erzeuger und Vernichter eine Funktion dieser Operatoren verwendet wird. Wir verwenden nun also

$$\hat{Q}_+ = \hat{B}^-(\hat{b}^+, \hat{b}^-) \hat{f}^+ \quad (41)$$

und

$$\hat{Q}_- = \hat{B}^+(\hat{b}^+, \hat{b}^-) \hat{f}^-. \quad (42)$$

Die Abhängigkeit von den fermionischen Operatoren lässt sich aufgrund der Nilpotenz nicht sinnvoll erweitern. Zusammen mit dem gewohnten Ansatz (18) für den

Hamiltonoperator folgt nun

$$\hat{H}_S = \hat{B}^- \hat{B}^+ \hat{f}^+ \hat{f}^- + \hat{B}^+ \hat{B}^- \hat{f}^- \hat{f}^+. \quad (43)$$

Aus der Hermitizität des Hamiltonoperators ergibt sich die Bedingung

$$\left(\hat{B}^-\right)^\dagger = \hat{B}^+. \quad (44)$$

Dieser Hamiltonoperator kommutiert zwar noch mit dem Fermionenzahloperator \hat{n}_f , aber im allgemeinen nicht mehr mit \hat{n}_b . Statt der Bosonenzahl verwenden wir daher die Energie eines Zustandes als zweite Quantenzahl.

2.2.1 Kanonische Darstellung

Das binäre Eigenwertspektrum des Fermionenzahlooperators legt es nun nahe, zu einer Darstellung überzugehen, welche dem Spinorformalismus analog ist. Zustände $|E, n_f\rangle$ lassen sich als Spaltenvektor schreiben, in dem der erste Eintrag $n_f = 0$ und der zweite $n_f = 1$ entspricht:

$$|E, n_f\rangle = \begin{pmatrix} |E, 0\rangle \\ |E, 1\rangle \end{pmatrix} \quad (45)$$

Die fermionischen Erzeuger und Vernichter besitzen dann die Form

$$\hat{f}^- = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \hat{f}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (46)$$

Damit folgt für die SUSY-Transformationen

$$\hat{Q}_1 = \hat{Q}_+ + \hat{Q}_- = \hat{B}^- \hat{f}^+ + \hat{B}^+ \hat{f}^- = \begin{pmatrix} 0 & \hat{B}^+ \\ \hat{B}^- & 0 \end{pmatrix} \quad (47)$$

sowie

$$\hat{Q}_2 = -i(\hat{Q}_+ - \hat{Q}_-) = -i(\hat{B}^- \hat{f}^+ - \hat{B}^+ \hat{f}^-) = \begin{pmatrix} 0 & i\hat{B}^+ \\ -i\hat{B}^- & 0 \end{pmatrix}. \quad (48)$$

Der Hamiltonoperator besitzt dann die Diagonalform

$$\hat{H}_S = \hat{Q}_1^2 = \begin{pmatrix} \hat{B}^+ \hat{B}^- & 0 \\ 0 & \hat{B}^- \hat{B}^+ \end{pmatrix}. \quad (49)$$

Eine weitere Darstellung ergibt sich aus den Kommutatoren und Antikommutatoren der bosonischen Operatoren

$$\hat{H}_S = \frac{1}{2} \{ \hat{B}^-, \hat{B}^+ \} \mathbb{1} - \frac{1}{2} [\hat{B}^-, \hat{B}^+] \sigma^3. \quad (50)$$

Dabei bezeichnet das Symbol $\mathbb{1}$ die 2×2 Einheits- und σ^3 die dritte Paulimatrix.

2.2.2 Das Superpotential

Um einen Ausdruck für die Operatoren \hat{B}^- und \hat{B}^+ zu erhalten, kann man auf die Operatoren des harmonischen Oszillators (26) zurückgreifen und die Ortskoordinaten durch das sogenannte Superpotential $\hat{W}(\hat{x})$ ersetzen:

$$\hat{B}^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\hat{W}(\hat{x}) \mp \frac{i\hat{p}}{\sqrt{m}} \right] \quad (51)$$

Eine Verallgemeinerung der Impulsabhängigkeit würde die gewohnte Form der kinetischen Energie im Hamiltonoperator zerstören und scheint unphysikalisch. Auf diesem, zunächst von E. Witten [3] gewählten Ansatz, ruht das gesamte Gebäude der supersymmetrischen Quantenmechanik. Für die Operatoren \hat{B}^- und \hat{B}^+ gilt nun in Ortsdarstellung

$$\{ \hat{B}^-, \hat{B}^+ \} = W^2 + \frac{\hat{p}^2}{m} \quad (52)$$

sowie

$$[\hat{B}^-, \hat{B}^+] = \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{dW}{dx}. \quad (53)$$

Zusammen mit (50) folgt dann für den Hamiltonoperator

$$H_S = \frac{1}{2} \left(\frac{\hat{p}^2}{m} + W^2 \right) \mathbb{1} - \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{dW}{dx} \frac{\sigma^3}{2}. \quad (54)$$

2.2.3 Superpotential und Grundzustand

Der Hamiltonoperator \hat{H}_S zerfällt in der kanonischen Darstellung in zwei Hamiltonoperatoren \hat{H}_1 und \hat{H}_2 :

$$\hat{H}_S = \begin{pmatrix} \hat{B}^+ \hat{B}^- & 0 \\ 0 & \hat{B}^- \hat{B}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{H}_1 & 0 \\ 0 & \hat{H}_2 \end{pmatrix}$$

Für einen Grundzustand von \hat{H}_S bei $E=0$ muss dabei gelten

$$\hat{H}_1 |00\rangle = 0 \quad \text{und} \quad \hat{H}_2 |01\rangle = 0.$$

Es lässt sich zeigen, dass diese beiden Gleichungen äquivalent sind zu Differentialgleichungen ersten Grades:

$$\hat{H}_1 |00\rangle = \hat{B}^+ \hat{B}^- |00\rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \hat{B}^- |00\rangle = 0 \quad (55)$$

$$\hat{H}_2 |01\rangle = \hat{B}^- \hat{B}^+ |01\rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \hat{B}^+ |01\rangle = 0 \quad (56)$$

Durch das Einsetzen der Operatoren aus (51) ergibt sich

$$\hat{B}^- |00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\hat{W}(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{\partial}{\partial x} \right] \psi_{00}(x) = 0 \quad (57)$$

und

$$\hat{B}^+ |00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\hat{W}(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{\partial}{\partial x} \right] \psi_{01}(x) = 0. \quad (58)$$

Diese Differentialgleichungen lassen sich elementar integrieren. Das führt auf die Grundzustandswellenfunktionen

$$\left. \begin{array}{l} \psi_{00}(x) \\ \psi_{01}(x) \end{array} \right\} = C \exp \left[\mp \frac{\sqrt{m}}{\hbar} \int_0^x W(x') dx' \right]. \quad (59)$$

Damit diese normierbar sind, müssen sie zumindest an den Rändern verschwinden. Es gelten also die zusätzlichen Bedingungen

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi_{00} = 0 \quad \Rightarrow \quad \int_0^{\pm\infty} dx' W(x') = \pm\infty \quad (60)$$

und

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi_{01} = 0 \quad \Rightarrow \quad \int_0^{\pm\infty} dx' W(x') = \mp\infty. \quad (61)$$

Da sich diese offensichtlich gegenseitig ausschließen, ist gezeigt, dass, sofern ein Grundzustand bei $E=0$ existiert, dieser nicht entartet sein kann. Ist eine der Bedingungen allerdings erfüllt, so kann die Grundzustandswellenfunktion ohne weiteres aus dem Superpotential berechnet werden. Interessanterweise ist auch der umgekehrte Weg möglich, und bei bekanntem, nicht entartetem Grundzustand, kann das Superpotential aus der Grundzustandswellenfunktion berechnet werden. Dazu ge-

nügt es, die Gleichungen (57) und (58) umzuformen, sodass

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{\psi'_{00}(x)}{\psi_{00}(x)} = -\frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{\partial}{\partial x} \ln \psi_{00} \quad (62)$$

bzw.

$$W(x) = \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{\psi'_{01}(x)}{\psi_{01}(x)} = \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{\partial}{\partial x} \ln \psi_{01} \quad (63)$$

folgt.

2.2.4 Eigenwerte und -zustände von H_1 und H_2

Grundlegend für die supersymmetrische Quantenmechanik sind die Zusammenhänge zwischen den beiden Komponenten des Hamiltonoperators \hat{H}_S , \hat{H}_1 und \hat{H}_2 . Bei der Untersuchung bietet sich nun eine neue Schreibweise der Zustände an, wobei $\psi_n^{(i)}$ die n -te Energieeigenfunktion von \hat{H}_i darstellt. Es gelten dann die Eigenwertgleichungen

$$\hat{H}_1 \psi_n^{(1)} = \hat{B}^+ \hat{B}^- \psi_n^{(1)} = E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} \quad (64)$$

und

$$\hat{H}_2 \psi_n^{(2)} = \hat{B}^- \hat{B}^+ \psi_n^{(2)} = E_n^{(2)} \psi_n^{(2)}. \quad (65)$$

Es zeigt sich nun, dass die bosonischen Operatoren \hat{B}^+ und \hat{B}^- die Eigenzustände von \hat{H}_1 und \hat{H}_2 ineinander überführen:

$$\hat{H}_1 \hat{B}^+ \psi_n^{(2)} = \hat{B}^+ \hat{B}^- \hat{B}^+ \psi_n^{(2)} = E_n^{(2)} \hat{B}^+ \psi_n^{(2)} \quad (66)$$

$$\hat{H}_2 \hat{B}^- \psi_n^{(1)} = \hat{B}^- \hat{B}^+ \hat{B}^- \psi_n^{(1)} = E_n^{(1)} \hat{B}^- \psi_n^{(1)} \quad (67)$$

Da dies für alle Zustände gilt, besitzen \hat{H}_1 und \hat{H}_2 für $E > 0$ außerdem ein identisches Eigenwertspektrum. Aus dieser Feststellung lassen sich nun scheinbar unzusammenhängende Potentiale miteinander in Verbindung bringen, indem man aus einem bekannten Grundzustand das Superpotential berechnet und daraus wiederum das zu \hat{H}_2 gehörige Partnerpotential. Man bezeichnet

$$V_1 = \frac{1}{2} \left[W^2 - \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{\partial W}{\partial x} \right] \quad \text{und} \quad V_2 = \frac{1}{2} \left[W^2 + \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{\partial W}{\partial x} \right] \quad (68)$$

daher als Partnerpotentiale.

2.3 Variationsrechnung

Der schweizer Physiker Walter Ritz veröffentlichte in seinem Todesjahr 1909 einen Artikel über die approximative Lösung von Randwertproblemen, welche auf die Extremalisierung eines Energieintegrals zurückgeführt werden konnten [6]. Die zunächst an Beispielen der klassischen Mechanik ausgeführte Methode sollte später ein wichtiges Werkzeug für quantenmechanische Berechnungen werden. Für einen Hamiltonoperator \hat{H} mit der Grundzustandsenergie E_0 gilt für beliebige Zustände $|\phi\rangle$

$$E_0 \leq \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}. \quad (69)$$

Dies lässt sich leicht beweisen, indem man $|\phi\rangle$ nach den Eigenzuständen $|\phi_i\rangle$ von \hat{H} entwickelt. Eingesetzt ergibt sich unter Ausnutzung der Orthogonalität

$$\frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \frac{\sum_i c_i^* \langle \phi_i | \hat{H} \sum_{i'} c_{i'} |\phi_{i'}\rangle}{\sum_i c_i^* \langle \phi_i | \sum_{i'} c_{i'} |\phi_{i'}\rangle} = \frac{\sum_i |c_i|^2 E_i}{\sum_i |c_i|^2}. \quad (70)$$

Mit $E_0 \leq E_i$ folgt dann die Behauptung. Der Ansatz der Variationsrechnung besteht nun darin, eine geeignete Testfunktion zu parametrisieren und die rechte Seite von (69) zu minimieren. Daraus erhält man eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie des Systems. Typischerweise wird in Lehrbüchern der anharmonische Oszillator als Beispiel behandelt und der Grundzustand des harmonischen Oszillators als Testfunktion verwendet. Mit der normierten Grundzustandswellenfunktion

$$\phi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\alpha^2 x^2}{2} \right) \quad (71)$$

und dem Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \lambda x^4 \quad (72)$$

ergibt sich der Erwartungswert

$$\begin{aligned} \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} &= \frac{\lambda \alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^4 \exp(-\alpha^2 x^2) dx \\ &\quad - \frac{\hbar^2 \alpha}{2m\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} [\alpha^4 x^2 \exp(-\alpha^2 x^2) - \alpha^2 \exp(-\alpha^2 x^2)] dx \end{aligned} \quad (73)$$

$$= \frac{3\lambda}{4\alpha^4} + \frac{\hbar^2 \alpha^2}{4m} = E(\alpha). \quad (74)$$

Diese Funktion besitzt ein Minimum bei $\alpha_m^6 = 6\lambda m/\hbar^2$ und

$$E(\alpha_m) = \left(\frac{3}{4}\right)^{\frac{4}{3}} \left(\frac{\lambda \hbar^4}{m^2}\right)^{\frac{1}{3}} \approx 0,68142 \left(\frac{\lambda \hbar^4}{m^2}\right)^{\frac{1}{3}}. \quad (75)$$

3 Der Anharmonische Oszillator

Ich werde mich in dieser Arbeit auf die Behandlung des reinen anharmonischen Oszillators

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \lambda \hat{x}^4 \quad (76)$$

sowie des gestörten, harmonischen Oszillators

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{g\hat{x}^2}{2} + \lambda \hat{x}^4 \quad (77)$$

beschränken. Ihre wichtige Bedeutung erlangen diese Systeme unter anderem dadurch, dass sie die ersten drei Glieder der Taylorentwicklung eines beliebigen symmetrischen Potentials darstellen. In sämtlichen Gebieten der Physik, von der Optik bis zur physikalischen Chemie, werden daher Näherungen durch anharmonische Oszillatoren verwendet, und das theoretische Studium dieser Systeme wurde dementsprechend kontinuierlich vorangetrieben. Während für die Energieniveaus des harmonischen Oszillators ein analytischer Ausdruck existiert, ist dies bei anharmonischen Oszillatoren in der Regel nicht der Fall. Ein besonderes Interesse gilt daher der Herleitung handhabbarer Formeln, welche die Energien des Systems über einen möglichst weiten Bereich der Kopplungskonstanten hinreichend genau beschreiben.

3.1 Das rein anharmonische System

Systeme, bei denen der quadratische Term des Potentials verschwindet, lassen sich näherungsweise durch den rein anharmonischen Oszillator beschreiben. Außerdem wurde von Chan und Stelman vorgeschlagen, die Eigenfunktionen als Basis zur linearen Variation allgemeinerer Systeme zu verwenden, in denen der biquadratische Term das Potential dominiert [7]. Der Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \lambda \hat{x}^4 \quad (78)$$

lässt sich durch die Variablensubstitutionen

$$x = \left(\hbar / \sqrt{\lambda m} \right)^{1/3} x' \quad (79)$$

und

$$E = \left(\frac{\lambda \hbar^4}{m^2} \right)^{1/3} E' \quad (80)$$

auf die in der Literatur gebräuchliche Form

$$\hat{H}' = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + x'^4 \quad (81)$$

bringen. Zusammen mit der Konvention $\hbar = 1$ und $m = 1$ ergeben sich dann die Energien des Systems in Einheiten von $\lambda^{1/3}$. Es genügt also, die Eigenwerte des Operators (81) zu tabellieren, aus denen dann für beliebige Kopplungskonstanten die Energieniveaus einfach berechnet werden können. Zur Berechnung wurde eine ganze Reihe von Methoden, unter anderem die WKB-Näherung [8], Potenzreihenansätze [9] und lineare Variation [7, 10], ins Feld geführt. Besonders durch lineare Variation, welche von Reid [10] mit bis zu 150 Basisfunktionen durchgeführt wurde, ließen sich die unteren Energieniveaus mit hoher Genauigkeit berechnen. Da die Menge der benötigten Basisfunktionen mit der maximalen Quantenzahl, bis zu der die Energien bestimmt werden, zunimmt, stößt diese Methode allerdings selbst mit heutiger Rechenkapazität früher oder später an ihre Grenzen. Banerjee et al. haben daher, durch die Entwicklung nach unterschiedlich skalierten Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators, eine Rekursionsformel hergeleitet, mit der die Eigenwerte über das gesamte Spektrum hinweg mit beliebiger Genauigkeit berechnet werden können [11].

3.1.1 Numerische Lösung mit Schießverfahren

Zunächst habe ich mit Hilfe des Schießverfahrens eine numerische Berechnung der Energieeigenwerte des Systems durchgeführt. Die zehn niedrigsten Anregungsenergien sind in Tabelle 1 eingetragen. Der Vergleich mit [11] zeigt, dass die berechneten Werte eine Genauigkeit von mindestens sechs Stellen aufweisen. Mit Runge-Kutta-Verfahren lassen sich auch die Wellenfunktionen berechnen. In Abbildung 2 sind

Quantenzahl n	E_n Schießverfahren $[\lambda^{1/3}]$	E_n Banerjee et al. $[\lambda^{1/3}]$
0	0,667986301	0,667986259
1	2,39364389	2,39364402
2	4,69679536	4,69679539
3	7,33573007	7,33573000
4	10,2443086	10,2443085
5	13,3793366	13,3793366
6	16,7118898	16,7118896
7	20,2208494	20,2208495
8	23,8899939	23,8899936
9	27,7063933	27,7063934

Tabelle 1: Numerisch berechnete Eigenwerte des rein anharmonischen Oszillators.

die normierten Wellenfunktionen des anharmonischen Oszillators über das Potential aufgetragen, wobei auf eine separate Skala für die Wahrscheinlichkeitsdichte verzichtet wurde. Zum Vergleich ist in Abbildung 3 das Potential des harmonischen Oszillators mit den entsprechenden Wellenfunktionen dargestellt. Dabei habe ich die Kopplungskonstante $\alpha = 6^{\frac{1}{6}}$ aus der Variation in Abschnitt 2.3 übernommen, um Vergleichbarkeit zu gewährleisten. Wie aufgrund des Potentialverlaufs zu erwarten war, verändert sich die räumliche Ausdehnung der Wellenfunktionen beim anharmonischen Oszillator mit zunehmender Quantenzahl wesentlich schwächer als beim harmonischen System. Dies deutet darauf hin, dass eine lineare Variation mit den Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators, ohne zusätzliche Skalierung, bei höheren Quantenzahlen zunehmend schlechtere Ergebnisse liefern wird.

3.1.2 Ritzsche Variation und SUSYQM

In Abschnitt 2.3 wurde beispielhaft der Grundzustand des harmonischen Oszillators variiert, um eine obere Grenze für die Grundzustandsenergie des rein anharmonischen Oszillators zu gewinnen. Das Ergebnis $E' = 0,68142$ weicht um 2% von dem exakten Wert $E' = 0,66798$ ab. Mit den Methoden der supersymmetrischen Quan-

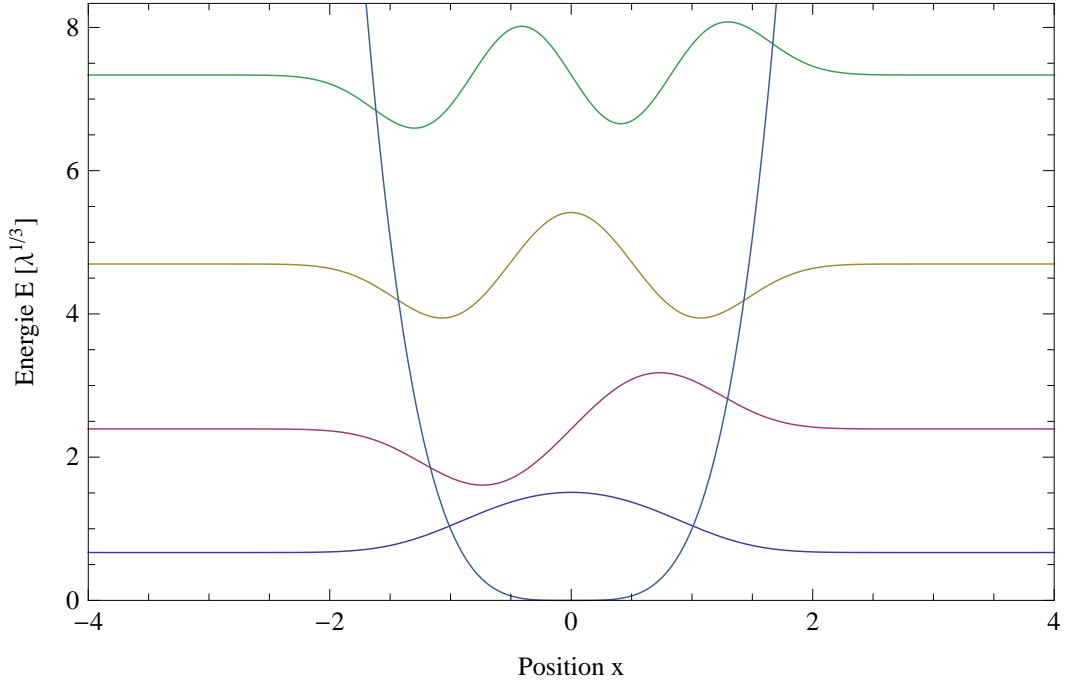


Abbildung 2: Wellenfunktionen des rein anharmonischen Oszillators.

tenmechanik haben Cooper et al. Näherungen für die angeregten Energieniveaus berechnet [4]. Dazu verwenden sie zunächst, statt der Grundzustandswellenfunktion des harmonischen Oszillators, die Testfunktion

$$\Psi_0^{(k)} = N_k \exp\left(-\frac{1}{2} \left| \frac{x^2}{\rho_k} \right|^{n_k}\right) \quad (82)$$

mit

$$N_k = \left[2\sqrt{\rho_k} \Gamma\left(1 + \frac{1}{2n_k}\right)\right]^{-1/2}. \quad (83)$$

Der Energieerwartungswert beträgt

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \hat{H}' | \Psi_0^{(0)} \rangle = E_0(\rho_0, n_0) = \frac{n_0^2}{2\rho_0^2} \frac{\Gamma\left(2 - \frac{1}{2n_0}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2n_0}\right)} + \rho_0^2 \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2n_0}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2n_0}\right)}. \quad (84)$$

Durch Minimierung über die Bedingungen

$$\frac{\partial E_0}{\partial \rho_0} = \frac{\partial E_0}{\partial n_0} = 0 \quad (85)$$

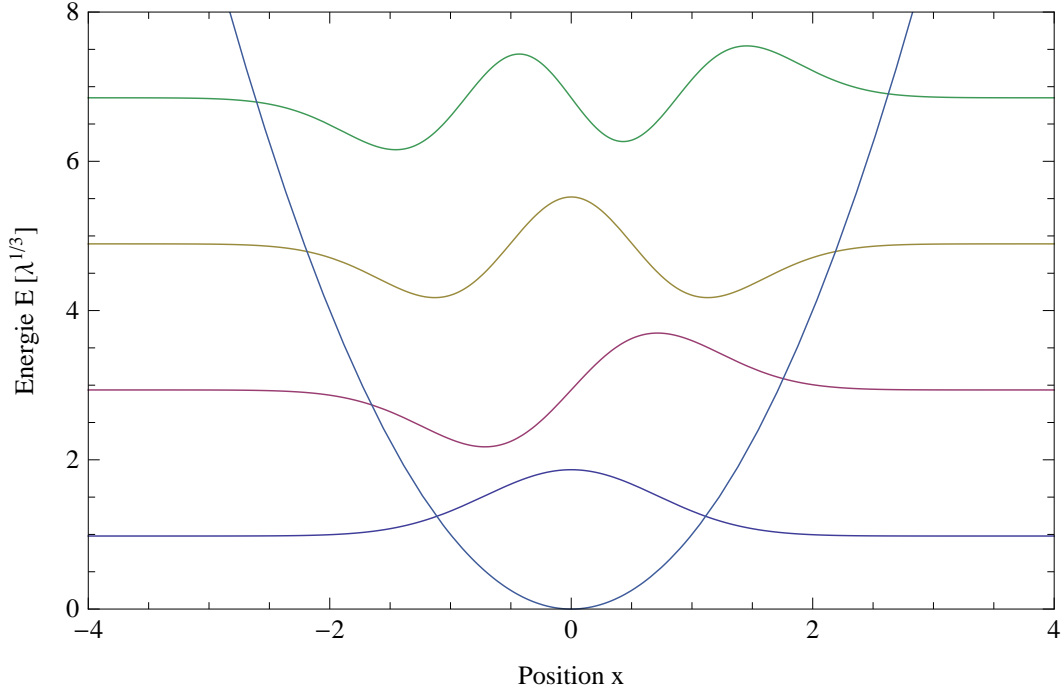


Abbildung 3: Wellenfunktionen des rein harmonischen Oszillators, $\alpha = 6^{\frac{1}{6}}$.

ergeben sich die optimalen Parameter $\rho_0 = 0,666721$ und $n_0 = 1,18346$ sowie die obere Grenze für die Grundzustandsenergie $E_0 = 0,66933$. Die Abweichung von dem exakten Wert konnte mit diesem Ansatz auf 0,2% verringert werden. Aus der SUSYQM ist bekannt, dass die Testfunktion den exakten Grundzustand eines eigenen „Testpotentials“ beschreibt. Das entsprechende Superpotential lässt sich mit (62) aus der Testfunktion berechnen:

$$W_{(k)}(x) = -\frac{\partial}{\partial x} \ln \Psi_0^{(k)} = \frac{n_k x |x^2|^{n_k-1}}{\rho^{n_k}} \quad (86)$$

Aufgrund des Verhaltens im Unendlichen lässt sich erkennen, dass ungebrochene Supersymmetrie vorliegt. Die Grundzustandsenergie des Partnerpotentials entspricht dann der des ersten angeregten Zustands des Testpotentials. Cooper et al. haben diese nun wieder durch Variation des Ansatzes (82),(83) approximiert und daraus eine Rekursionsformel für die Abstände zwischen den Energieniveaus erhalten. Das Partnerpotential lautet

$$V_2^{(k)} = \frac{1}{2} \left[W_{(k)}^2 + \frac{\partial W_{(k)}}{\partial x} \right] \quad (87)$$

und die obere Schranke für die Energiedifferenz zum nächst höheren Niveau

$$\Delta E_{k+1}(\rho_{k+1}, n_{k+1}) = \left\langle \Psi_0^{(k+1)} \left| -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \left[W_{(k)}^2 + \frac{\partial W_{(k)}}{\partial x} \right] \right| \Psi_0^{(k+1)} \right\rangle = E_{k+1} - E_k. \quad (88)$$

Diese lässt sich elementar integrieren zu

$$\begin{aligned} \Delta E_{k+1}(\rho_{k+1}, n_{k+1}) &= \frac{n_{k+1}^2}{2\rho_{k+1}} \frac{\Gamma\left(2 - \frac{1}{2n_{k+1}}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2n_{k+1}}\right)} + \frac{n_k^2}{2\rho_{k+1}} \left(\frac{\rho_{k+1}}{\rho_k}\right)^{2n_k} \frac{\Gamma\left(\frac{4n_k-1}{2n_{k+1}}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2n_{k+1}}\right)} \\ &\quad + \frac{n_k}{2\rho_{k+1}} (2n_k - 1) \left(\frac{\rho_{k+1}}{\rho_k}\right)^{n_{k+1}-1} \frac{\Gamma\left(\frac{2n_k-1}{2n_{k+1}}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2n_{k+1}}\right)}. \end{aligned} \quad (89)$$

Dieser Ausdruck muss nun jeweils bezüglich ρ_{k+1} und n_{k+1} minimiert werden. Für die ersten fünf Energieniveaus sind die entsprechenden Parameter und Energieabstände in Tabelle 2 aufgeführt. Während die ersten drei Energieabstände in relativ

Quantenzahl k	ρ_k	n_k	ΔE_k SUSYQM	ΔE_k Numerisch
0	0,66672136	1,1834583	0,669330	0,667986
1	0,42982878	0,99583433	1,72758	1,72566
2	0,43560367	1,0005962	2,31640	2,30315
3	0,43477921	0,99991715	2,29708	2,63893
4	0,43489383	1,0000116	2,29982	2,90858
5	0,43487783	0,99999839	2,29944	3,13503

Tabelle 2: Energieabstände des rein anharmonischen Oszillators aus Ritz'scher Variation mit SUSYQM.

guter Näherung mit dem beschriebenen Verfahren berechnet werden können, weicht die Energie des vierten Anregungsniveaus schon in der ersten Nachkommastelle ab. Eine numerische Auswertung für größere Quantenzahlen zeigt, dass die Parameter ρ_k und n_k gegen die Werte $\rho = 0,43487979$ und $n = 1.0000000$ konvergieren. Der Energieabstand nähert sich damit dem Wert $\Delta E_k = 2,2994860$ an. Die numerische Berechnung der tatsächlichen Energieabstände zeigt, dass diese zumindest bis $k=400$ streng monoton ansteigen und nicht konvergieren. Die Methode geht von zwei wesentlichen Annahmen aus. Zunächst wird vorausgesetzt, dass die Energieniveaus des zur Testfunktion gehörenden Potentials eine gute Approximation der Energien des anharmonischen Oszillators darstellen. Darüber hinaus wird angenommen, dass der ursprüngliche Ansatz (82),(83) auch für die Grundzustandswellenfunktionen der

Partnerpotentiale eine hinreichend genaue Beschreibung erlaubt. Die numerisch bestimmten Energieabstände des SUSY-Potentials

$$V_1^{(0)} = \frac{1}{2} \left[W_{(0)}^2 - \frac{\partial W_{(0)}}{\partial x} \right] \quad (90)$$

sind in Tabelle 3 eingetragen. Nach Konstruktion liegt die Grundzustandsenergie

Quantenzahl k	ΔE_k
1	1,72717
2	2,31375
3	2,36094
4	2,56798

Tabelle 3: Energieabstände des SUSY-Potentials $V_{(0)}$.

bei $E_0 = 0$. Der Vergleich mit den exakten Werten des anharmonischen Oszillators zeigt tatsächlich für $k \geq 2$ eine zunehmende Abweichung. Es stellt sich außerdem heraus, dass die Variation mit dem Ansatz (82) auch hier gute Ergebnisse liefert. Eine Berechnung für höhere Quantenzahlen zeigt, dass auch für das SUSY-Potential die Energieabstände monoton zu steigen scheinen. Die beobachtete Konvergenz ergibt sich also aus dem Verfahren der rekursiven Berechnung.

3.1.3 Variation nach Knotenverfahren

Ein anderes Verfahren zur Berechnung der Energien angeregter Zustände mit Hilfe von SUSYQM und Variationsrechnung wurde von Mukharjee et. al. beschrieben [1]. Für das diskrete Spektrum eindimensionaler Bewegungen gilt der sogenannte Knotensatz, der besagt, dass die Wellenfunktion des $(n+1)$ -ten Energieeigenzustandes n Knoten besitzt [12]. Man kann davon ausgehen, dass eine Testfunktion, welche die Position dieser Knoten berücksichtigt, zur Variation angeregter Zustände verwendet werden kann. Die Bedingung (69) ist dabei nicht erfüllt, so dass eine Abschätzung der Güte dieser Näherung sich als schwierig erweist. Es zeigt sich jedoch, dass mit einem solchen Vorgehen gute Ergebnisse erzielt werden können. Über die SUSY-Partnerpotentiale werden nun nicht die Energieabstände, sondern die Knotenpositionen bestimmt. Unter Ausnutzung der Relation (66) können mit Hilfe der SUSY-Operatoren $\hat{B}_{(k)}^+$ die Grundzustandswellenfunktionen der Partnerpotentiale sukzessive in angeregte Wellenfunktionen des ursprünglichen Potentials überführt werden. Bezeichnet man mit $\psi_n^{(k)}$ die n -te Wellenfunktion des k -ten Potentials, so

gilt

$$\psi_n^{(0)}(x) = \hat{B}_{(1)}^+ \cdot \dots \cdot \hat{B}_{(n)}^+ \psi_0^{(n)}. \quad (91)$$

Anschließend können die Knoten von $\psi_n^{(0)}$ bestimmt und in eine Testfunktion als Linearfaktoren integriert werden:

$$\psi_T(x, r_1, \dots, r_m) = (x - x_1^{(0)}) \cdot \dots \cdot (x - x_n^{(0)}) \cdot f(x, r_1, \dots, r_m) \quad (92)$$

Die Funktion $f(x, r_1, \dots, r_m)$ muss analog zu der Testfunktion der klassischen Variation gewählt werden und kann im Prinzip über eine beliebige Menge variierbarer Parameter verfügen. Mukharjee et. al. empfehlen in ihrer Veröffentlichung, nicht weniger als drei Parameter zur Variation zu verwenden. Um die Ergebnisse mit den zuletzt gewonnenen Werten vergleichen zu können, habe ich gegen diesen Rat verstoßen und den Ansatz (82), (83) für $f(x, \rho, n)$ gewählt.

Die Rolle der Parität Für den Spezialfall eines symmetrischen Potentials kommutiert der Hamiltonoperator mit dem Paritätsoperator. Dies bedeutet, dass es ein vollständiges System von Energieeigenzuständen gibt, welche auch Eigenzustände des Paritätsoperators darstellen. Da im diskreten Spektrum eindimensionaler Bewegungen keine Entartung auftritt [12], besitzt dort jeder Energieeigenzustand eine definierte Parität. Berücksichtigt man, dass bei einer Wellenfunktion mit n Knoten genau $n+1$ Extremstellen auftreten und sich dabei Minima und Maxima abwechseln müssen, so folgt aus dem Knotensatz, dass sich bei einer eindimensionalen Bewegung im symmetrischen Potential die Paritäten der Energieeigenzustände abwechseln, beginnend mit einem geraden Grundzustand. Da für ungerade Wellenfunktionen $\psi(0) = 0$ gilt, ist die einzige Nullstelle des ersten angeregten Zustands bekannt. Dies wird von Mukharjee ausgenutzt, um das Schema (91) um einen Schritt zu reduzieren auf

$$\psi_n^{(0)} = \hat{B}_{(1)}^+ \cdot \dots \cdot \hat{B}_{(n-1)}^+ \psi_1^{(n-1)}. \quad (93)$$

Der erste angeregte Zustand des n -ten Potentials lässt sich dann durch Variation der Testfunktion

$$\psi_T(x, r_1, \dots, r_m) = x \cdot f(x, r_1, \dots, r_m) \quad (94)$$

nähern.

Anwendung Für den anharmonischen Oszillator kann damit die Energie des ersten angeregten Zustandes noch ganz ohne SUSYQM-Methoden variiert werden. Der Ansatz dazu lautet, unter Berücksichtigung der Nullstelle bei $x = 0$,

$$\psi_T(x) = N \cdot x \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \left| \frac{x^2}{\rho} \right|^n\right) \quad (95)$$

mit einem Normierungsfaktor N . Eine Variation des Energieerwartungswertes bezüglich des Hamiltonoperators (81) liefert das Ergebnis

$$E_1 \leq 2,39537 \quad (96)$$

Die exakte Energie des ersten angeregten Zustandes ist dabei tatsächlich kleiner oder gleich dem ermittelten Wert, da ungerade und gerade Zustände exakt orthogonal zueinander sind. Mit der schon berechneten Näherung für die Grundzustandsenergie $E_0 \leq 0,669330$ entspricht das einem Energieabstand von $\Delta E_1 = 1,72604$. Ein Vergleich mit dem exakten Wert $\Delta E_1 = 1,72566$ aus Tabelle 2 zeigt, dass dies eine leichte Verbesserung gegenüber dem vorherigen Ergebnis $\Delta E_1 = 1,72758$ darstellt. Um die Energie des zweiten angeregten Zustandes zu berechnen, kann nun das Partnerpotential (86) herangezogen werden. Das kann mit den Parametern ρ_0 und n_0 (Tabelle 2) und der Gleichung (87) aus dem Superpotential (86) berechnet werden. Die Variation mit der Testfunktion (95) und Anwendung des Schemas (93) führt schließlich auf eine Wellenfunktion $\psi_n^{(0)}(x)$ mit Nullstellen bei $x_0 = \pm 0,517911$, in guter Übereinstimmung mit dem numerischen Ergebnis $x_0 = \pm 0,512667$. Damit lautet die Ansatzfunktion zur Variation des dritten Energieniveaus

$$\psi_T(x) = N \cdot (x^2 - 0,517911^2) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \left| \frac{x^2}{\rho} \right|^n\right). \quad (97)$$

Die Variation des Energieerwartungswertes liefert damit $E_2 \approx 4,6994$, was einem Energieabstand von $\Delta E_2 \approx 2,30457$ entspricht. Ein Vergleich mit den Ergebnissen des Cooper-Verfahrens zeigt hier eine deutliche Verbesserung. Die Ergebnisse bis zum fünften Energieniveau sind zusammen mit den vorherigen und numerischen Ergebnissen in Tabelle 4 eingetragen. Es zeigt sich, dass die Güte der Näherung für $n=4$ stark einbricht. Näherungsweise ergeben sich die Nullstellen der vierten Wellenfunktion zu $x_0^{(1)/(2)} = \pm 1,10783$ und $x_0^{(3)/(4)} = \pm 0,365304$, was noch in relativ guter Übereinstimmung mit den numerisch ermittelten Werten $x_0^{(1)/(2)} = \pm 1,05097$ und $x_0^{(3)/(4)} = \pm 0,347037$ zu sein scheint. Bessere Ergebnisse lassen sich demnach

n	ΔE_n Mukharjee	Rel. Fehler	ΔE_n Cooper	Rel. Fehler	ΔE_n Numerisch
0	0,669330	0,0020	0,669330	0,0020	0,667986
1	1,72604	0,00022	1,72758	0,0011	1,72566
2	2,30457	0,00062	2,31640	0,0058	2,30315
3	2,56944	0,026	2,29708	0,13	2,63893
4	2,42095	0,16	2,29982	0,21	2,90858

Tabelle 4: Vergleich der Ergebnisse des Mukharjee- und Cooper-Verfahrens beim rein anharmonischen Oszillator mit relativen Fehlern.

wahrscheinlich durch eine Testfunktion mit drei oder mehr Variationsparametern erzielen.

3.2 Das biquadratische System

Ein allgemeineres System wird durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{g\hat{x}^2}{2} + \lambda\hat{x}^4 \quad (98)$$

beschrieben. Hier ist eine Substitution, welche den Hamiltonoperator von den Kopplungskonstanten unabhängig macht, nicht mehr möglich. Stattdessen werden in der Literatur zwei Spezialfälle unterschieden. Durch die Substitutionen $x = (gm)^{-1/4} x'$, $E = \sqrt{g/m} E'$ und $\lambda = (g^5 m)^{1/4} \lambda'$ lässt sich der Hamiltonoperator auf die Form

$$\hat{H}' = \frac{\hat{p}'^2}{2} + \frac{\hat{x}'^2}{2} + \lambda' \hat{x}'^4 \quad (99)$$

bringen. Eine Entwicklung nach λ' entspricht nun einem leicht gestörten harmonischen Oszillator und wird als schwache Kopplung bezeichnet. Für den Fall starker Kopplung können die Substitutionen $x = (m\lambda)^{-1/6} x'$, $E = \left(\frac{\lambda}{m^2}\right)^{1/3} E'$ und $g = (m\lambda)^{1/6} g'$ angewandt werden. Der resultierende Operator

$$\hat{H}' = \frac{\hat{p}'^2}{2} + \frac{g'\hat{x}'^2}{2} + \hat{x}'^4 \quad (100)$$

lässt sich anschließend nach g' entwickeln und beschreibt ein System, in dem die Dynamik im wesentlichen durch den anharmonischen Anteil generiert wird. Ich werde die Güte der zuvor besprochenen Näherungsverfahren an einem biquadratischen Oszillator mit den Kopplungskonstanten $m = g = 1$ und $\lambda = 1/2$ testen, um die numerischen Ergebnisse wieder mit denen von Banerjee et al. vergleichen zu können [11].

Diese Parameter liegen zwischen den Bereichen der starken und schwachen Kopplung und sind damit störungstheoretisch nicht zugänglich. Der Übersichtlichkeit halber bietet es sich dennoch an, den Hamiltonoperator in der schwach gekoppelten Form (99) zu verwenden. Die Energieeigenwerte werden daher im folgenden in Einheiten von $\sqrt{g/m}$ angegeben ($\hbar = 1$). Die numerisch berechneten Energieeigenwerte sind in Tabelle 5 eingetragen und die entsprechenden Wellenfunktionen in Abbildung 4 dargestellt. Das von Cooper et al. beschriebene Verfahren kann mit dem Ansatz (82),

Quantenzahl n	E_n Schießverfahren	E_n Banerjee et al.
0	0,69617579	0,69617582
1	2,3244064	2,3244064
2	4,3275249	4,3275249
3	6,5794019	6,5784019
4	9,0287787	9,0287787
5	11,648721	11,648721
6	14,417669	14,417669
7	17,320424	17,320424
8	20,345193	20,345193
9	23,482505	23,482505

Tabelle 5: Numerisch berechnete Eigenwerte des biquadratischen Oszillators.

(83) ohne weiteres auf das biquadratische System angewandt werden, da der rekursive Ausdruck für die Energieabstände 89 nur von der verwendeten Testfunktion und nicht von der Form des Potentials abhängt. Auch das Vorgehen bei der Anwendung des Knotenkorrekturverfahrens ist im Wesentlichen identisch. Die Berechnung der

n	ΔE_n Mukharjee	Rel. Fehler	ΔE_n Cooper	Rel. Fehler	ΔE_n Numerisch
0	0,696969	0,0011	0,696969	0,0011	0,696176
1	1,62859	0,00022	1,63179	0,0020	1,62823
2	2,00405	0,00047	1,98993	0,0066	2,00311
3	-	-	1,96331	0,13	2,25088
4	-	-	1,96712	0,20	2,45037

Tabelle 6: Vergleich der Ergebnisse des Mukharjee- und Cooper-Verfahrens beim biquadratischen Oszillator mit relativen Fehlern.

Energie des vierten Niveaus ergab nach der Mukharjee Methode keinen realistischen Wert, da das Energieintegral zwar ein Plateau, aber kein echtes Minimum zu besitzen scheint. Für das fünfte Niveau lässt sich die Energie interessanterweise wieder sinnvoll berechnen. Es ergibt sich eine Energie von $E_4 = 8,60311$, welche allerdings nur eine grobe Näherung des tatsächlichen Wertes von $E_4 = 9,02877$ darstellt. Für

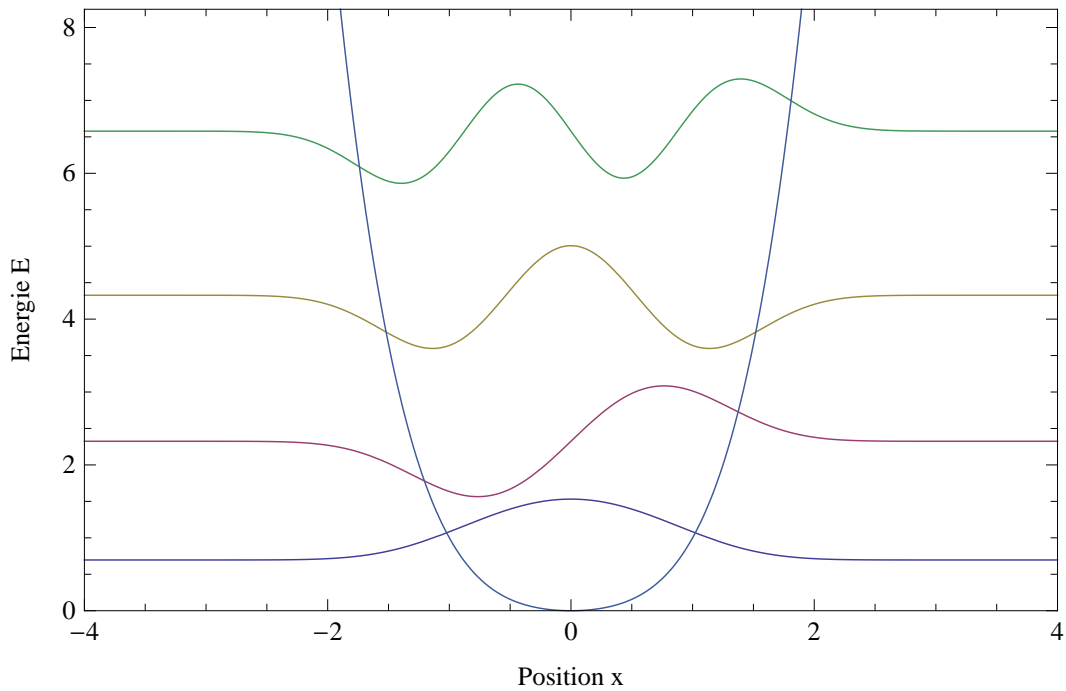


Abbildung 4: Wellenfunktionen und Potential des biquadratischen Oszillators mit den Parametern $g=m=1$ und $\lambda = 1/2$.

die ersten drei Energieeigenzustände liefert das Verfahren allerdings wieder eine Abschätzung von bemerkenswerter Genauigkeit und stellt eine deutliche Verbesserung gegenüber dem von Cooper beschriebenen dar.

4 Zusammenfassung

Die Anwendung der von Cooper und Mukharjee vorgeschlagenen Techniken auf zwei verschiedene Potentiale hat gezeigt, dass zumindest für die ersten angeregten Zustände gute bis sehr gute Näherungen der Energien durch Kombination des Rayleigh-Ritz-Verfahrens mit dem Formalismus der supersymmetrischen Quantenmechanik zu erwarten sind. Bei beiden Verfahren brach die Güte der Näherung ab einem bestimmten Energieniveau jedoch drastisch ein, was eine Anwendung ohne numerische Vergleichswerte problematisch macht. Für die Berechnung der ersten zwei angeregten Energieniveaus haben die Verfahren für beide Potentiale eine gute Näherung geliefert, was für die Behandlung niedrig angeregter Systeme z.B. in der Quantenchemie, ausreichen kann. Eine Besonderheit des Cooper-Verfahrens ist, dass die Rekursionsformel für die Energieabstände ausschließlich von der gewählten Testfunktion ab-

hängt und die Form des eigentlichen Potentials nur durch zwei Variationsparameter eingeht. Dass sich dennoch relativ gute Näherungen der Energieabstände ergeben, ist erstaunlich. Eine weitergehende Untersuchung des Einflusses der Testfunktion erscheint lohnenswert, geht aber über das Ziel dieser Arbeit hinaus. Das Mukharjee-Verfahren erweist sich als dem Cooper-Verfahren durchweg überlegen, so lässt sich die Energie der ersten beiden Anregungszustände für beide Potentiale mit einem relativen Fehler der Größenordnung 10^{-4} berechnen. Interessanterweise ist die Genauigkeit für die ersten beiden Anregungszustände höher als für den herkömmlich variierten Grundzustand. Dies lässt sich dadurch erklären, dass die tatsächlichen Energien keine unteren Schranken mehr darstellen und sich die Abweichungen des Energieintegrals über den Verlauf der Testfunktion teilweise herausmitteln. Die Anwendung des Cooper-Verfahrens auf das n -te Energieniveau erfordert insgesamt n , die des Mukharjee-Verfahrens $n+1$ bzw. unter Ausnutzung der Symmetrie ebenfalls n Variationsschritte. Im allgemeinen und auch für die in dieser Arbeit behandelten Beispiele lässt sich die Variation nicht mehr analytisch durchführen und erfordert numerische Verfahren, welche für Testfunktionen mit mehr als einem Parameter einen nicht vernachlässigbaren Rechenaufwand bedeuten. Im Prinzip lassen sich die einzelnen Variationsschritte allerdings auch mit unterschiedlichen Testfunktionen durchführen. Bei dem Mukharjee-Verfahren könnte also durchaus eine Variation mit zwei Parametern zur Bestimmung der Knotenpositionen und anschließend eine aufwendigere Variation der gesuchten Anregungsenergie angewandt werden. Sind allerdings nur die Energieniveaus eines konkreten Systems von Interesse, so ist in der praktischen Anwendung ein rein numerisches Verfahren wohl überlegen.

Literatur

- [1] N. Mukharjee and K. Bhattacharyya. Rayleigh-ritz method for excited quantum states via nonlinear variations without constraints: role of supersymmetry. *J. Quantum. Chem.*, 112:960–971, 2012.
- [2] H. Nicolai. Supersymmetry and spin systems. *J. Phys. A-Math. Gen.*, 9(9):1497–1506, 1976.
- [3] E. Witten. Dynamical breaking of supersymmetry. *Nucl. Phys. B*, 188(3):513–554, 1981.
- [4] F. Cooper, J. Dawson, and H. Shepard. Susy-based variational method for the anharmonic oscillator. *Phys. Lett. A*, 187:140–144, 1994.
- [5] H. Kalka and G. Soff. *Supersymmetrie*. Teubner, 1997.
- [6] W. Ritz. Über eine neue methode zur lösung gewisser variationsprobleme der mathematischen physik. *J.Reine Angew.Math.*, 135:1–61, 1909.
- [7] S. I. Chan and D. Stelman. Some energy levels and matrix elements of the quartic oscillator. *J. Mol. Spectrosc.*, 10:278–299, 1963.
- [8] J. E. Kilpatrick and M. F. Kilpatrick. The energy levels and thermodynamic funtions of the fourth power oscillator. *J. Chem. Phys.*, 16:781–787, 1948.
- [9] L. Vescelius and V. D. Neff. Solution of the one-dimensional schrödinger equation by the method of continued fractions. *J. Chem. Phys.*, 49:1740–1744, 1967.
- [10] C. E. Reid. Energy eigenvalues and matrix elements for the quartic oscillator. *J. Mol. Spectrosc.*, 36:183–191, 1970.
- [11] K. Banerjee, S. P. Bhatnagar, V. Choudhry, and S. S. Kanwwal. The anharmonic oscillator. *Proc. R. Soc. Lond. A.*, 360:575–586, 1978.
- [12] L. D. Landau and E. M. Lifschitz. *Quantenmechanik*. Verlag Harri Deutsch, 9 edition, 1986.

Tabellenverzeichnis

1	Numerisch berechnete Eigenwerte des rein anharmonischen Oszillators.	15
2	Energieabstände des rein anharmonischen Oszillators aus Ritz'scher Variation mit SUSYQM.	18
3	Energieabstände des SUSY-Potentials $V_{(0)}$	19
4	Vergleich der Ergebnisse des Mukharjee- und Cooper-Verfahrens beim rein anharmonischen Oszillator mit relativen Fehlern.	22
5	Numerisch berechnete Eigenwerte des biquadratischen Oszillators. . .	23
6	Vergleich der Ergebnisse des Mukharjee- und Cooper-Verfahrens beim biquadratischen Oszillator mit relativen Fehlern.	23