

Bachelorarbeit

Doppelmuldenpotential und Tunneleffekt

in der Supersymmetrischen Quantenmechanik

Semir Vrana
Matrikel-Nr.: 362250
semir.vrana@wwu.de

Erstgutachter: Prof. Klasen
Zweitgutachter: Prof. Münster

10.05.2012

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1
2 Supersymmetrische Quantenmechanik	3
2.1 Faktorisierung des Hamilton-Operators	3
2.2 Das Partnerpotential	4
2.3 SUSY-Algebra	7
2.4 Spontan gebrochene Supersymmetrie	9
2.5 Formale SUSY-Quantenmechanik	10
2.6 SWKB-Näherung	12
3 Doppelmuldenpotential und Tunneleffekt	13
3.1 Klassische Bewegung im Doppelmuldenpotential	13
3.2 Tunnelwahrscheinlichkeit	14
3.3 WKB-Näherung	15
3.4 Die Doppelmulde und ihr SUSY-Partner	17
3.5 Regularisierung der Grundzustandswellenfunktion	19
4 Diskussion	23
A WKB-Näherung	24
B Numerisches Lösen der Schrödingergleichung	25
C Asymmetrische Doppelmuldenpotentiale	27
C.1 Die Doppelmulde und ihr SUSY-Partner	27
C.2 Regularisierung des Grundzustands	28

1 Einleitung

Wenn ein System sich bei einer Transformation invariant bleibt, sich also nicht ändert, bezeichnet man es als symmetrisch. So verändert sich eine Kugel nicht, wenn man sie um einen bestimmten Winkel um den Mittelpunkt dreht. In der Physik spielen Symmetrien eine besondere Rolle. Nach dem Noether-Theorem sind kontinuierliche Symmetrien mit der Existenz von Erhaltungsgrößen verknüpft, die einem das Lösen von Problemen erleichtern. Eine besondere Symmetrie stellt die Supersymmetrie dar.

Supersymmetrie

Die Welt besteht aus zwei Teilchensorten, den Fermionen und den Bosonen, die in ihren Eigenschaften grundverschieden sind. Fermionen haben einen halbzahligen Spin und sie genügen dem Pauliprinzip, nach dem sich keine zwei Fermionen im gleichen Zustand befinden können, während Bosonen einen ganzzahligen Spin haben und beliebig viele von ihnen im gleichen Zustand sein können. Fermionen sind die Grundbausteine von Materie, während Bosonen die Austauschteilchen von Wechselwirkungen sind. Fermionen genügen der Fermi-Dirac-Statistik und Bosonen der Bose-Einstein-Statistik.

1971 haben verschiedene Arbeitsgruppen die Supersymmetrie (SUSY) entdeckt [Zum], die bosonische und fermionische Freiheitsgrade miteinander in Beziehung setzt. Eine Folgerung aus supersymmetrischen Theorien ist, dass alle Teilchen des Standardmodells supersymmetrische Partnerteilchen haben, die jeweils der anderen Statistik genügen und sonst identisch sind. Bosonen haben also fermionische Partnerteilchen und umgekehrt. Die Tatsache, dass diese Partnerteilchen noch nicht entdeckt wurden, führt zu der Vermutung, dass SUSY eine spontan gebrochene Symmetrie ist und die Massen der SUSY-Teilchen so groß sind, dass sie bisher nicht beobachtet wurden.

Supersymmetrische Theorien haben einige sehr vorteilhafte Eigenschaften. Zum Beispiel werden dadurch einige Divergenzen in Quantenfeldtheorien abgeschwächt und das leichteste Neutralino, ein Partnerteilchen der neutralen elektroschwachen Eich- und Higgs-Bosonen, ist ein Anwärter für die dunkle Materie.

Supersymmetrische Quantenmechanik

Bemerkenswerterweise spielt SUSY auch in der nichtrelativistischen Quantenmechanik eine Rolle, obwohl der Spin der Teilchen, und damit auch die Statistik, keine Rolle spielt, es sei denn man postuliert den Spin. 1976 hat Nicolai erstmals Supersymmetrie in der nichtrelativistischen Quantenmechanik verwendet, um eine Kette aus Bosonen und Fermionen zu beschreiben [Nic]. Witten nutzte die supersymmetrische Quantenmechanik (SUSY QM) als Grenzfall einer supersymmetrischen Quantenfeldtheorie, um die spontane Symmetriebrechung in einem System, bestehend aus einem Spin- $\frac{1}{2}$ -

Teilchen zu untersuchen [Wit].

SUSY führt in der Quantenmechanik dazu, dass zu jedem System ein Partnersystem existiert, das bis auf die Grundzustandsenergie das gleiche Spektrum besitzt und deren Eigenzustände miteinander verknüpft sind. Außerdem lassen sich mit Hilfe von SUSY die bekannten Näherungsmethoden verbessern, bzw. neue Näherungen finden. In dieser Bachelorarbeit wird so die Energieaufspaltung des Grundzustands bei einem Doppelmuldenpotential bestimmt [Coo].

Doppelmuldenpotential

Das Doppelmuldenpotential ist ein beliebtes Modell zur Erklärung vieler Phänomene in der Physik und Chemie. Ein Beispiel ist etwa die Chiralität von Molekülen [Wie]. Bei chiralen Molekülen existieren zwei Atomkonfigurationen, die aus den gleichen Atomsorten bestehen, aber nicht durch Rotation ineinander überführbar sind, siehe auch in Abbildung 1 die beiden vieratomigen Moleküle, die aus Atomen der gleichen „Farbe“ bestehen, die aber nicht durch Rotation auseinander hervorgehen. Die beiden möglichen Konfigurationen können sich in ihren physikalischen und chemischen Eigenschaften stark unterscheiden. Durch den quantenmechanischen Tunneleffekt ist es aber möglich, dass sich die Konfigurationen ineinander umwandeln.

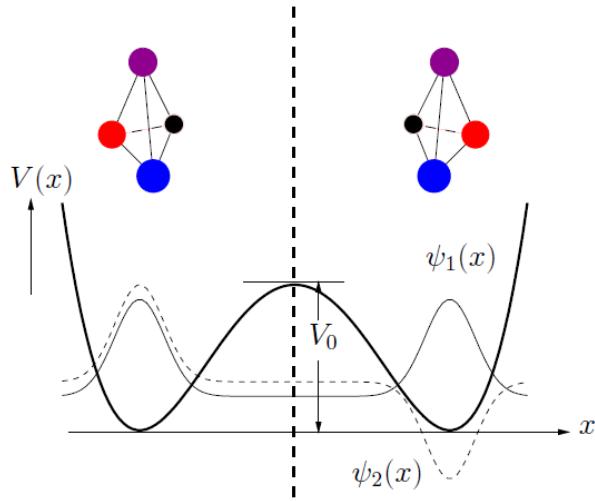


Abbildung 1: Das Doppelmuldenpotential zur Erklärung der Chiralität von Molekülen. Die Zustände in den Mulden entsprechen der linkshändigen- bzw. rechtshändigen Konfiguration. Aus [Wie]

Zum Doppelmuldenpotential gelangt man in diesem Modell, indem man in der

Born-Oppenheimer-Näherung¹ die Schrödingergleichung für die Bindungselektronen löst und das Potential der Elektronen im Grundzustand auf die Inversionsachse (die Verbindungslinie des „roten“ und des „schwarzen“ Atoms) projiziert. Ein prominentes Beispiel für ein chirales Molekül ist das Ammoniak [Bra], bei dem das Stickstoff-Atom oberhalb oder unterhalb der durch die Wasserstoffatome aufgespannten Ebene ist. Die beiden Konfigurationen lassen sich nicht durch Rotation ineinander überführen, da die Pyramide gekippt ist.

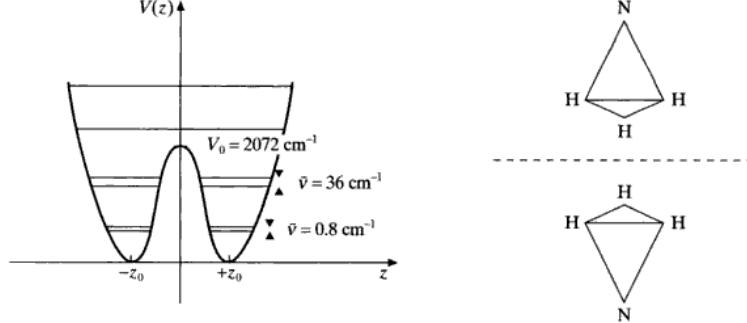


Abbildung 2: Die beiden Konfigurationen des Ammoniak und das zugehörige Doppelmuldenpotential. Aus [Bra]

Wie in Abschnitt 3.2 gezeigt wird, führt der Tunneleffekt zu einer Aufspaltung der Energieniveaus. Dies wird z.B. beim Ammoniak-Maser verwendet, siehe [Bra].

2 Supersymmetrische Quantenmechanik

2.1 Faktorisierung des Hamilton-Operators

Wenn der Grundzustand $\psi_0(x)$ eines Systems bekannt ist, lässt sich daraus das gesamte Potential $V_1(x)$ rekonstruieren. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann man annehmen, dass die Grundzustandsenergie verschwindet, da das Potential ebenfalls nur bis auf eine additive Konstante bestimmt ist. Es ist dann [Coo]

$$\hat{H}_1 \psi_0(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi_0''(x) + V_1(x) \psi_0(x) = 0, \quad (2.1)$$

$$\Rightarrow V_1(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_0''(x)}{\psi_0(x)}. \quad (2.2)$$

¹In der Born-Oppenheimer-Näherung geht man davon aus, dass die Atomkerne viel trüger sind als die Elektronen, so dass man die Kerndynamik und die der Elektronen getrennt betrachten kann.

Jeder Hamiltonoperator lässt sich nun als Komposition zweier zueinander adjungierter Operatoren schreiben

$$\hat{H}_1 = \hat{B}^\dagger \hat{B}, \quad (2.3)$$

wobei

$$\hat{B} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W(x), \quad \hat{B}^\dagger = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W(x). \quad (2.4)$$

Für die Funktion $W(x)$, die man Superpotential nennt, erhält man durch Einsetzen von (2.4) in (2.3)

$$V_1(x) = W^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x). \quad (2.5)$$

Diese Differentialgleichung für $W(x)$ nennt man Riccati-Gleichung [Kal]. Aus $\hat{B}\psi_0(x) = 0$ folgt bereits $\hat{H}_1\psi_0(x) = \hat{B}^\dagger \hat{B}\psi_0(x) = 0$. Andererseits folgt $\hat{B}\psi_0(x) = 0$ aus $\hat{H}_1\psi_0(x) = 0$, da

$$0 = \langle \psi_0 | \hat{H}_1 | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | \hat{B}^\dagger \hat{B} | \psi_0 \rangle = \left\| \hat{B}\psi_0(x) \right\|^2, \quad (2.6)$$

wobei $\|.\|$ die L_2 -Norm ist. Damit lässt sich $W(x)$ analog zu $V_1(x)$ durch den Grundzustand ausdrücken.

$$\hat{B}\psi_0(x) = \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W(x) \right) \psi_0(x) = 0, \quad (2.7)$$

$$\Rightarrow W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)} = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} \ln(\psi_0(x)). \quad (2.8)$$

Außerdem folgt aus (2.6), dass man bei bekanntem Superpotential anstelle der Differentialgleichung zweiter Ordnung $\hat{H}\psi_0(x) = 0$ die DGL erster Ordnung $\hat{B}\psi_0(x) = 0$ zur Bestimmung des Grundzustands verwenden kann.

2.2 Das Partnerpotential

Zu einer supersymmetrischen Theorie gelangt man nun, indem man einen zweiten Hamiltonoperator $\hat{H}_2 := \hat{B}\hat{B}^\dagger$ einführt [Coo], mit

$$\hat{H}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V_2(x)\psi(x), \quad V_2(x) = W^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x). \quad (2.9)$$

Man bezeichnet $V_2(x)$ als Partnerpotential von $V_1(x)$. Wie im folgenden gezeigt wird, hängen die Eigenzustände und Eigenenergien von \hat{H}_1 und \hat{H}_2 eng zusammen. Zur Unterscheidung der Eigenzustände und -energien der beiden Hamiltonoperatoren werden

diese mit einem oberen Index gekennzeichnet, $\psi^{(i)}$ und $E_n^{(i)}$, $i = 1, 2$. Aus der Schrödinger-Gleichung für \hat{H}_1 ,

$$\hat{H}_1 \psi_n^{(1)} = E_n^{(1)} \psi_n^{(1)}, \quad (2.10)$$

folgt

$$\hat{H}_2 \left(\hat{B} \psi_n^{(1)} \right) = \hat{B} \hat{B}^\dagger \hat{B} \psi_n^{(1)} = E_n^{(1)} \left(\hat{B} \psi_n^{(1)} \right). \quad (2.11)$$

Analog folgt aus

$$\hat{H}_2 \psi_n^{(2)} = E_n^{(2)} \psi_n^{(2)} \quad (2.12)$$

für die Eigenzustände von \hat{H}_1

$$\hat{H}_1 \left(\hat{B}^\dagger \psi_n^{(2)} \right) = \hat{B}^\dagger \hat{B} \hat{B}^\dagger \psi_n^{(2)} = E_n^{(2)} \left(\hat{B}^\dagger \psi_n^{(2)} \right). \quad (2.13)$$

Die Operatoren \hat{B}, \hat{B}^\dagger transformieren die Eigenzustände von \hat{H}_1 zu Eigenzuständen von \hat{H}_2 und umgekehrt. Wegen (2.6) gilt dies nur nicht für den Grundzustand von \hat{H}_1 . Aus (2.10) bis (2.13) folgt dann

$$E_n^{(2)} = E_{n+1}^{(1)}, \quad E_0^{(1)} = 0 \quad (2.14)$$

$$\psi_n^{(2)} = \left[E_{n+1}^{(1)} \right]^{-1/2} \hat{B} \psi_{n+1}^{(1)}, \quad (2.15)$$

$$\psi_{n+1}^{(1)} = \left[E_n^{(2)} \right]^{-1/2} \hat{B}^\dagger \psi_n^{(2)}. \quad (2.16)$$

Wenn die Zustände $\psi_n^{(1)}$ normiert sind, dann sind die Zustände $\psi_n^{(2)}$ ebenfalls normiert. In Abbildung 3 ist das Spektrum eines supersymmetrischen Systems skizziert.

Im folgenden Beispiel wird die oben hergeleitete Methode noch einmal verdeutlicht.

Beispiel 1 (Unendlicher Potentialtopf). Der Hamiltonoperator für die Bewegung eines Teilchens in einem Potentialtopf mit der Breite L lautet

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) \quad \text{mit} \quad V_1(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}. \quad (2.17)$$

Man erhält als Eigenzustände und Eigenenergien

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left(\frac{(n+1)\pi}{L} x \right), \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n+1)^2}{2m L^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.18)$$

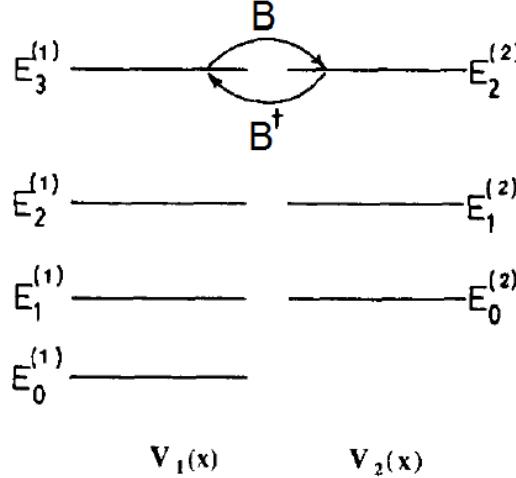


Abbildung 3: Die Entartung der Spektren von V_1 und V_2 . Entnommen aus [Coo].

Für das Ausspielen der Supersymmetrie muss die Grundzustandsenergie verschwinden. Daher betrachtet man den Hamiltonoperator

$$\hat{H}_1 = \hat{H} - E_0, \quad (2.19)$$

der das erfüllt. Dieser Hamiltonoperator hat die gleichen Eigenzustände wie \hat{H} und die Eigenenergien

$$E_n^{(1)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n(n+2). \quad (2.20)$$

Aus dem Grundzustand $\psi_0(x) = \sqrt{2/L} \sin(\pi x/L)$ erhält man mit (2.8) das Superpotential

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi'_0(x)}{\psi_0(x)} = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\pi}{L} \cot \frac{\pi x}{L}. \quad (2.21)$$

Aus (2.9) erhält man damit das Partnerpotential im Bereich $[0, L]$

$$V_2(x) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left(\frac{2}{\sin^2(\pi x/L)} - 1 \right). \quad (2.22)$$

Dieses Form dieses Potentials ist viel komplizierter als die von $V_1(x)$ und die Lösung nicht so einfach zu ermitteln. Dank der Supersymmetrie sind die Eigenenergien bereits bekannt, $E_n^{(2)} = E_{n+1}^{(1)}$, und aus (2.15) lassen sich die Eigenzustände bestimmen. Aus (2.4) folgen die Operatoren \hat{B}, \hat{B}^\dagger

$$\hat{B} = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\pi}{L} \cot \frac{\pi x}{L} - \frac{d}{dx} \right), \quad \hat{B}^\dagger = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\pi}{L} \cot \frac{\pi x}{L} + \frac{d}{dx} \right) \quad (2.23)$$

Damit erhält man etwa für den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand

$$\psi_0^{(2)}(x) = \frac{1}{\sqrt{E_1^{(2)}}} \hat{B} \psi_1^{(1)} = -\sqrt{\frac{8}{3L}} \sin^2 \frac{\pi x}{L}, \quad (2.24)$$

$$\psi_1^{(2)}(x) = \frac{1}{\sqrt{E_2^{(2)}}} \hat{B} \psi_2^{(1)} = -\frac{2}{\sqrt{L}} \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{2\pi x}{L}. \quad (2.25)$$

Die weiteren Zustände werden analog bestimmt. Hier konnte man also mit Hilfe von Supersymmetrie die Zustände eines Teilchen im komplizierten Potential V_2 aus denen im einfachen Potential V_1 bestimmen. Die ersten Zustände sind in Abbildung 4 eingezeichnet.

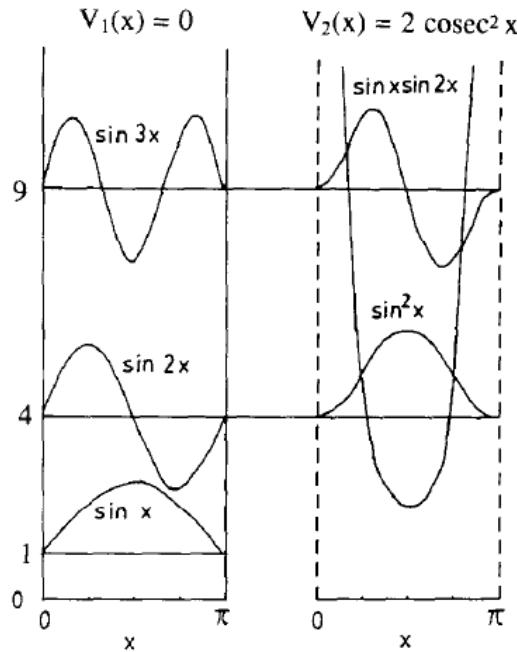


Abbildung 4: Der Potentialtopf und sein SUSY-Partner. Entnommen aus [Cool]

2.3 SUSY-Algebra

Die Supersymmetrie lässt sich am besten dadurch ausdrücken, dass man von den beiden Hamilton-Operatoren \hat{H}_1 und \hat{H}_2 zu einer Matrix

$$\hat{H}_S = \begin{pmatrix} \hat{H}_1 & 0 \\ 0 & \hat{H}_2 \end{pmatrix} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + W^2(x) \right] \mathbb{I} - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{dW(x)}{dx} \sigma_3 \quad (2.26)$$

übergeht [Coo], mit der Einheitsmatrix \mathbb{I} und der Pauli-Matrix

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

Diese Darstellung nennt man kanonische Darstellung. Man führt außerdem die sog. Superladungen

$$\hat{Q} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hat{B} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \hat{Q}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & \hat{B}^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.28)$$

ein. Durch Nachrechnen zeigt man dann folgende Kommutator- und Antikommator²-Relationen,

$$[\hat{H}_S, \hat{Q}] = [\hat{H}_S, \hat{Q}^\dagger] = \hat{0}, \quad (2.29)$$

$$\{\hat{Q}, \hat{Q}\} = \{\hat{Q}^\dagger, \hat{Q}^\dagger\} = \hat{0}, \quad (2.30)$$

$$\{\hat{Q}, \hat{Q}^\dagger\} = \hat{H}_S. \quad (2.31)$$

Dies ist eine SUSY-Algebra. Man bezeichnet \hat{Q} als Generator der Supersymmetrie oder als Superladung. Dabei ist (2.29) verantwortlich für die Entartung der Eigenenergien. Man interpretiert den Operator \hat{Q} dann so, dass er einen bosonischen Freiheitsgrad in einen fermionischen umwandelt. Aus (2.30) folgt, dass $\hat{Q}^2 = (\hat{Q}^\dagger)^2 = \hat{0}$ gilt, was die Einhaltung des Pauli-Prinzips garantiert. Die Wellenfunktion schreibt sich als Vektor,

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi^{(1)}(x) \\ \psi^{(2)}(x) \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} \text{Boson} \\ \text{Fermion} \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

Anstelle von \hat{Q} und \hat{Q}^\dagger , die nicht hermitesch sind, lassen sich auch hermitesch Operatoren \hat{Q}_1 und \hat{Q}_2 einführen [Kal], mit

$$\hat{Q}_1 = \hat{Q} + \hat{Q}^\dagger, \quad (2.33)$$

$$\hat{Q}_2 = -i(\hat{Q} - \hat{Q}^\dagger). \quad (2.34)$$

Damit ist $\hat{Q} = 1/2(\hat{Q}_1 + i\hat{Q}_2)$, also ist (2.33), (2.34) eine Zerlegung in Real- und Imaginärteil. Mit (2.29) bis (2.31) zeigt man

$$\{\hat{Q}_1, \hat{Q}_2\} = \hat{0}, \quad (2.35)$$

$$[\hat{H}_S, \hat{Q}_1] = [\hat{H}_S, \hat{Q}_2] = \hat{0}, \quad (2.36)$$

$$\hat{Q}_1^2 = \hat{Q}_2^2 = \hat{H}_S. \quad (2.37)$$

Dies ist ebenfalls eine SUSY-Algebra. Beide Operatorpaare lassen sich in supersymmetrischen Modellen verwenden.

²Man definiert für zwei Operatoren \hat{A} und \hat{B} den Antikommator durch $\{\hat{A}, \hat{B}\} := \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$

2.4 Spontan gebrochene Supersymmetrie

Bisher wurde nur der Fall betrachtet, dass die Grundzustandsenergie von \hat{H}_1 verschwindet, $E_0^{(1)} = 0$. Ist dies gegeben, so spricht man von exakter Supersymmetrie und der Generator der Symmetrie lässt den Grundzustand verschwinden, $\hat{Q}\psi_0(x) = \hat{Q}^\dagger\psi_0(x) = 0$. Wegen $\hat{H}_S\psi_0(x) = \{\hat{Q}, \hat{Q}^\dagger\}\psi_0(x) = 0$ verschwindet dann die Grundzustandsenergie.

Man spricht nun von einer spontan gebrochenen Symmetrie, wenn der Grundzustand eines Systems diese Symmetrie nicht besitzt, obwohl der Hamilton-Operator mit dem Generator vertauscht, wie in (2.29), also die Symmetrie besitzt [Kal]. Das heißt, dann ist $\hat{Q}\psi_0(x) \neq 0$.

Aus (2.7) folgt aus gegebenen Superpotential der Grundzustand von \hat{H}_1 mit $E_0^{(1)} = 0$ und aus $\hat{B}^\dagger\psi_0^{(2)} = 0$ den Grundzustand von \hat{H}_2 mit $E_0^{(2)} = 0$. Man erhält

$$\psi_0^{(1)}(x) = C \exp\left(-\frac{\sqrt{m}}{\hbar} \int_0^x W(\xi) d\xi\right), \quad (2.38)$$

$$\psi_0^{(2)}(x) = C \exp\left(\frac{\sqrt{m}}{\hbar} \int_0^x W(\xi) d\xi\right). \quad (2.39)$$

Da die Wellenfunktion normierbar sein muss, muss die Exponentialfunktion für $|x| \rightarrow \infty$ verschwinden. Daraus ergeben sich folgende, sich ausschließende Fälle:

1. $\psi_0^{(1)}(x)$ ist Grundzustand bei $E = 0$, wenn

$$\int_{-\infty}^0 W(x) dx = -\infty \quad \text{und} \quad \int_0^\infty W(x) dx = \infty. \quad (2.40)$$

Die Supersymmetrie ist dann exakt.

2. $\psi_0^{(2)}(x)$ ist Grundzustand bei $E = 0$, wenn

$$\int_{-\infty}^0 W(x) dx = \infty \quad \text{und} \quad \int_0^\infty W(x) dx = -\infty. \quad (2.41)$$

Die Supersymmetrie ist auch hier exakt.

3. Es existiert kein Zustand bei $E = 0$, und die Supersymmetrie ist spontan gebrochen.

Ob die Symmetrie gebrochen ist, hängt also nur vom globalen Verhalten des Superpotentials ab. Für exakte Supersymmetrie darf das Superpotential also im Unendlichen nicht verschwinden. Mit den Definitionen

$$W_+ = \lim_{x \rightarrow \infty} W(x), \quad W_- = \lim_{x \rightarrow -\infty} W(x), \quad W_\pm \neq 0, \quad (2.42)$$

erhält man die äquivalenten Bedingungen

1. $W_- < 0$ und $W_+ > 0 \Rightarrow$ SUSY exakt.
2. $W_- > 0$ und $W_+ < 0 \Rightarrow$ SUSY exakt.
3. $W_\pm > 0$ oder $W_\pm < 0 \Rightarrow$ SUSY gebrochen.

	SUSY exakt	gebrochen
	— — — —	— — — —
	— — — —	— — — —
$E = 0$	— — — —	— — — —

Abbildung 5: Schematische Darstellung der Spektren der Partnerpotentiale bei exakter und gebrochener SUSY. Entnommen aus [Kal]

Da bei gebrochener Supersymmetrie $\hat{B}\psi_0^{(1)} \neq 0$ gilt, ist das Energiespektrum der Partner-Systeme identisch,

$$E_n^{(2)} = E_n^{(1)} > 0. \quad (2.43)$$

Für die Eigenzustände erhält man

$$\psi_n^{(2)} = [E_n^{(1)}]^{-1/2} \hat{B}\psi_n^{(1)} \quad \text{und} \quad \psi_n^{(1)} = [E_n^{(2)}]^{-1/2} \hat{B}^\dagger \psi_n^{(2)}. \quad (2.44)$$

Die ist in Abbildung 5 skizziert. Im Gegensatz zur exakten Supersymmetrie werden hier Zustände mit gleicher Quantenzahl n miteinander verknüpft.

2.5 Formale SUSY-Quantenmechanik

Formal besteht eine supersymmetrische Theorie aus dem Satz [Jaf], [Jun]

$$(\mathcal{H}, \hat{H}, \hat{\tau}, \hat{Q}_1, \dots, \hat{Q}_N). \quad (2.45)$$

Dabei beschreibt (\mathcal{H}, \hat{H}) die gewöhnliche Quantenmechanik, bestehend aus einem Hilbertraum \mathcal{H} und einem Hamiltonoperator \hat{H} . Die Supersymmetrie entsteht durch die Involution $\hat{\tau}$ und die Superladungen \hat{Q}_i . Die in dieser Arbeit behandelte SUSY-Quantenmechanik entspricht dem Fall $N = 2$.

Die Involution ist ein Operator, der zweimal angewandt den Einsoperator ergibt,

$$\hat{\tau}^\dagger \hat{\tau} = \hat{\tau} \hat{\tau}^\dagger = \hat{\tau}^2 = \hat{1}. \quad (2.46)$$

daraus folgt, dass τ nur die Eigenwerte 1 und -1 besitzt. Die zugehörigen Eigenräume werden als \mathcal{H}_+ und \mathcal{H}_- bezeichnet und der Hilbertraum zerfällt in eine orthogonale Summe $\mathcal{H} = \mathcal{H}_+ \oplus \mathcal{H}_-$. Diese Zerlegung legt die Darstellung der Zustände als zweidimensionale Vektoren und der Operatoren als 2×2 -Matrizen wie in Abschnitt 2.3 nahe. Die Projektionsoperatoren

$$\hat{P}_\pm = \frac{1}{2}(\hat{1} \pm \hat{\tau}) \quad (2.47)$$

angewandt auf \mathcal{H} liefern \mathcal{H}_\pm . Man bezeichnet \mathcal{H}_+ als bosonischen (geraden) und \mathcal{H}_- als fermionischen ungeraden Unterraum. Ein beliebiger hermitescher Operator \hat{A} lässt sich mithilfe der Projektionsoperatoren in einen geraden und einen ungeraden Anteil zerlegen,

$$\hat{A} = (\hat{P}_+ \hat{A} \hat{P}_+ + \hat{P}_- \hat{A} \hat{P}_-) + (\hat{P}_+ \hat{A} \hat{P}_- + \hat{P}_- \hat{A} \hat{P}_+) = \hat{A}_b + \hat{A}_f. \quad (2.48)$$

Aus $\hat{\tau} \hat{P}_\pm = \pm \hat{P}_\pm$ und $[\hat{\tau}, \hat{P}_\pm] = \hat{0}$ folgt

$$[\hat{A}_b, \hat{\tau}] = \hat{0}, \quad (2.49)$$

$$\{\hat{A}_f, \hat{\tau}\} = \hat{0}. \quad (2.50)$$

Ein Operator der mit der Involution vertauscht, ist also ein gerader Operator, einer der mit der Involution antivertauscht ist ungerade. Gerade Operatoren lassen $\mathcal{H}_+, \mathcal{H}_-$ invariant, ungerade Operatoren erzeugen Übergänge zwischen \mathcal{H}_+ und \mathcal{H}_- . Die Involution ist ein gerader Operator. Nun bezeichnet man einen hermiteschen Operator \hat{Q}_i , der die Bedingungen

$$\hat{Q}_i = \hat{Q}_i^\dagger \quad (2.51)$$

$$\{\hat{Q}_i, \hat{\tau}\} = \hat{0}, \quad (2.52)$$

$$\{\hat{Q}_i, \hat{Q}_j\} = 2\delta_{ij}\hat{H}_S \quad (2.53)$$

erfüllt, als Superladung bezüglich $\hat{\tau}$. Wegen (2.52) sind Superladungen ungerade Operatoren und verknüpfen so bosonische und fermionische Zustände. In der gewöhnlichen Quantenmechanik kommen hingegen nur gerade Operatoren vor. Den Operator \hat{H}_S nennt man supersymmetrischen Hamiltonoperator. Sind die Operatoren \hat{Q}_1, \hat{Q}_2 Superladungen, dann sind die Operatoren \hat{Q}'_1, \hat{Q}'_2 mit

$$\begin{pmatrix} \hat{Q}'_1 \\ \hat{Q}'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{Q}_1 \\ \hat{Q}_2 \end{pmatrix}, \quad \alpha \in [0, 2\pi). \quad (2.54)$$

ebenfalls Superladungen [Jun], erfüllen also auch die SUSY-Algebra, bzw. für die komplexen Superladungen $\hat{Q} = 1/2(\hat{Q}_1 + i\hat{Q}_2)$ ist \hat{Q}' auch eine Superladung falls

$$\hat{Q}' = e^{-i\alpha} \hat{Q}, \quad \hat{Q}'^\dagger = e^{i\alpha} \hat{Q}^\dagger. \quad (2.55)$$

Dies ist mit einer Eichsymmetrie verknüpft. Transformiert man die Zustände in \mathcal{H}_\pm nach

$$|\psi'^\pm\rangle = e^{i\beta_\pm} |\psi^\pm\rangle, \quad (2.56)$$

dann bleibt bei der Wahl $\alpha = \beta_+ - \beta_-$ in (2.54) die Supersymmetrie erhalten, also insbesondere (2.15), (2.16). Die Darstellungen in diesem Abschnitt gelten insbesondere auch in der relativistischen Quantenmechanik.

2.6 SWKB-Näherung

In diesem Abschnitt soll die WKB-Quantisierungbedingung (A.11),

$$\int_a^b \sqrt{2m[E_n - V(x)]} dx = \hbar\pi \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (2.57)$$

mit Hilfe von Supersymmetrie verbessert werden. Dazu wird das Potential in (2.57) durch (2.5) ersetzt,

$$\int_a^b \sqrt{2m \left[E_n^{(1)} - W^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) \right]} dx = \hbar\pi \left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (2.58)$$

a und b sind die klassischen Umkehrpunkte. Die Wurzel wird nun bis zur ersten Ordnung nach Potenzen von \hbar entwickelt. Dabei wird angenommen, dass $W(x)$ nicht von \hbar abhängt. Man erhält

$$\int_a^b \sqrt{2m \left[E_n^{(1)} - W^2(x) \right]} + \frac{\hbar}{2} \int_a^b \frac{W'(x) dx}{\sqrt{E_n^{(1)} - W^2(x)}} + \mathcal{O}(\hbar^2) = \hbar\pi \left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (2.59)$$

Die weiteren Schritte hängen davon ab, ob die Supersymmetrie exakt oder spontan gebrochen ist.

SWKB bei exakter Supersymmetrie

Der zweite Summand in (2.59) lässt sich direkt integrieren,

$$\frac{\hbar}{2} \int_a^b \frac{W'(x) dx}{\sqrt{E_n^{(1)} - W^2(x)}} = \frac{\hbar}{2} \arcsin \left[\frac{W(x)}{\sqrt{E_n^{(1)}}} \right]_a^b. \quad (2.60)$$

Da die Supersymmetrie exakt ist, hat das Superpotential an den Umkehrpunkten unterschiedliche Vorzeichen und es gilt

$$-W(a) = W(b) = \sqrt{E_n^{(1)}}. \quad (2.61)$$

Damit ergibt das Integral in (2.60) den Wert $\hbar\pi/2$ und die SWKB-Quantisierungbedingung lautet

$$\int_a^b \sqrt{2m \left[E_n^{(1)} - W^2(x) \right]} = n\hbar\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.62)$$

Analog erhält man für das Partnerpotential $V_2(x)$

$$\int_a^b \sqrt{2m \left[E_n^{(2)} - W^2(x) \right]} = (n+1)\hbar\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.63)$$

Für $n = 0$ steht auf der linken Seite von (2.62) eine Null. Dies wird erfüllt durch $a = b$ und man erhält $E_0^{(1)} = 0$, das exakte Ergebnis. Während die WKB-Näherung nur für große n gute Ergebnisse liefert [Kal], ist die SWKB-Näherungen also für den Grundzustand exakt, weshalb man insgesamt bessere Ergebnisse erwartet.

Der Vergleich von (2.62) und (2.63) zeigt, dass die SWKB-Näherung die Niveauentartung, $E_{n+1}^{(1)} = E_n^{(2)}$, reproduziert.

SWKB bei gebrochener Supersymmetrie

Bei gebrochener Supersymmetrie hat das Superpotential in den Umkehrpunkten das gleiche Vorzeichen und man erhält

$$W(a) = W(b) = \sqrt{E_n^{(1)}}. \quad (2.64)$$

Mit (2.60) verschwindet dann der zweite Summand in (2.59) und man erhält die SWKB Quantisierungsbedingung

$$\int_a^b \sqrt{2m \left[E_n^{(1)} - W^2(x) \right]} = \hbar\pi \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (2.65)$$

Analog erhält man für das Partnerpotential

$$\int_a^b \sqrt{2m \left[E_n^{(2)} - W^2(x) \right]} = \hbar\pi \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (2.66)$$

Man sieht, dass auch hier die typische Niveauentartung, $E_n^1 = E_n^2$, reproduziert wird.

3 Doppelmuldenpotential und Tunneleffekt

3.1 Klassische Bewegung im Doppelmuldenpotential

Bevor das Doppelmuldenpotential quantenmechanisch behandelt wird, soll zunächst die klassische Dynamik betrachtet werden. Für die Bewegung im Doppelmuldenpo-

tential $V(x) = x^4 - x^2$ lautet die klassische Hamiltonfunktion

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + x^4 - x^2 \quad (3.1)$$

Dies führt zu den kanonischen Bewegungsgleichungen

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -4x^3 + 2x, \quad \frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}. \quad (3.2)$$

Die daraus folgende Dynamik ist im Phasenraumdiagramm in Abbildung 6 eingezeichnet.

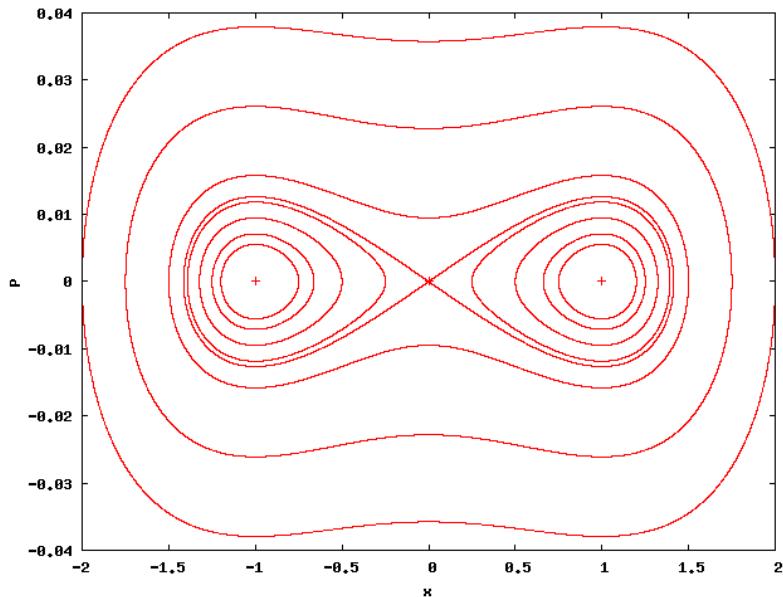


Abbildung 6: Der klassische Phasenraum für die Bewegung eines Teilchens im Doppelmuldenpotential.

Man erkennt in Abbildung 6, dass es zwei Lösungstypen gibt. Wenn die Energie des Teilchens groß ist, schwingt das Teilchen über beide Mulden hinweg. Bei kleinen Energien kann sich das Teilchen nur in einer der Mulden aufhalten und hat keine Möglichkeit, in die andere Mulde zu gelangen. Dies ist der große Unterschied zur Quantenmechanik.

3.2 Tunnelwahrscheinlichkeit

Ein Teilchen in einer Mulde kann in die andere Mulde durchtunneln. Die Wahrscheinlichkeit hierfür hängt eng mit der Energiedifferenz der beiden ersten Zustände

zusammen [Mün]. Der Grundzustand $|0\rangle$ mit der Energie E_0 ist symmetrisch, der erste angeregte Zustand $|1\rangle$ mit der Energie E_1 ist antisymmetrisch. Ein Teilchen befindet sich nun in der linken Mulde. Den Zustand kann man durch den gemischten Zustand $|L\rangle = 1/\sqrt{2}(|0\rangle + |1\rangle)$ beschreiben. Nach dem Tunneln soll sich das Teilchen in der rechten Mulde, also im Zustand $|R\rangle = 1/\sqrt{2}(|0\rangle - |1\rangle)$ befinden. Das Übergangsmatrixelement ist dann

$$\langle L | \hat{H} | R \rangle = 2(E_0 - E_1) = -2\Delta E. \quad (3.3)$$

Diese Energiedifferenz wird im folgenden mit verschiedenen Methoden berechnet.

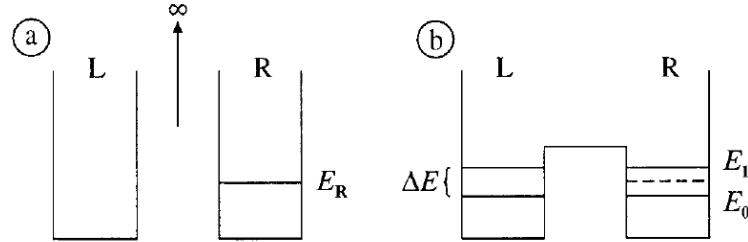


Abbildung 7: Links: Ein Doppelmuldenpotential mit unendlicher Potentialbarriere. Rechts: Ein Doppelmuldenpotential mit endlicher Barriere. Entnommen aus [Kal]

3.3 WKB-Näherung

Zur Energieaufspaltung in der WKB-Näherung gelangt man durch folgende Überlegung [Kal]. Bei einem Doppelmuldenpotential mit unendlich hoher Potentialbarriere zwischen den Mulden existieren nur Energieniveaus für die Bewegung in der einen oder anderen Mulde, siehe Abbildung 7. Die Niveaus E_L und E_R der beiden Mulden sind entartet. Verringert sich die Potentialbarriere, so wird die Entartung aufgehoben und die Energien spalten sich auf. Ein Teilchen kann sich nun in beiden Mulden bewegen.

Die ersten beiden Zustände können aus den Zuständen in den beiden Mulden $\psi_R(x) = \langle x | R \rangle$ und $\psi_L(x) = \langle x | L \rangle = \psi_R(-x)$ näherungsweise konstruiert werden.

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_R(x) + \psi_R(-x)], \quad \psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_R(x) - \psi_R(-x)]. \quad (3.4)$$

Zu beachten ist aber, dass die Zustände ψ_0, ψ_1 und ψ_L, ψ_R in dieser Näherung unterschiedlich normiert sind, es gilt nämlich³

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{0,1}^2 dx \approx \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_R^2(x) + \psi_R^2(-x)) dx \\ &= \frac{1}{2} \left(\int_0^{\infty} \psi_R^2(x) dx + \int_{-\infty}^0 \psi_R^2(-x) dx \right) = \int_0^{\infty} \psi_R^2(x) dx. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Dabei wurde ausgenutzt, dass $\psi_R(x)$ für negative x vernachlässigbar klein ist. Damit ist auch $\psi_R(x) \cdot \psi_R(-x) \approx 0$. Um die Energieaufspaltung $\Delta E = (E_1 - E_R) + (E_R - E_0)$ zu bestimmen, betrachtet die Schrödinger-Gleichungen

$$\psi_R''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E_R - V(x)) \psi_R(x) = 0, \quad \psi_0''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E_0 - V(x)) \psi_0(x) = 0. \quad (3.6)$$

Man multipliziert die erste Gleichung mit $\psi_0(x)$, die zweite mit $\psi_R(x)$, subtrahiert beide voneinander und erhält

$$\psi_R''(x) \psi_0(x) - \psi_R(x) \psi_0''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E_0 - E_R) \psi_R(x) \psi_0(x). \quad (3.7)$$

Durch Integration von 0 bis ∞ und eine partielle Integration auf der linken Seite erhält man

$$\left[\psi_R'(x) \psi_0(x) - \psi_R(x) \psi_0'(x) \right]_0^{\infty} = \frac{2m}{\hbar^2} (E_0 - E_R) \int_0^{\infty} \psi_R(x) \psi_0(x) dx. \quad (3.8)$$

Im Unendlichen verschwindet die Wellenfunktion. Für $x = 0$ erhält man aus (3.4) $\psi_0(0) = \sqrt{2} \psi_R(0)$ und wegen

$$\psi_0'(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_R'(0) - \psi_R'(-0)] \quad (3.9)$$

erhält man $\psi_0'(0) = 0$. Mit (3.4) und (3.5) erhält man

$$\int_0^{\infty} \psi_R(x) \psi_0(x) dx \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^{\infty} \psi_R^2(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (3.10)$$

Damit erhält man

$$E_R - E_0 = \frac{\hbar^2}{m} \psi_R(0) \psi_R'(0). \quad (3.11)$$

³Eigentlich muss man bei der Normbildung über das Betragsquadrat integrieren. Da Eigenzustände aber nur bis auf eine konstante Phase $e^{i\phi}$ bestimmt sind, lassen sie sich immer reell wählen, und man kann die Betragsbildung weglassen.

Analog erhält man für $E_1 - E_R$ den gleichen Ausdruck. Damit folgt für die Energieaufspaltung

$$\Delta E = \frac{2\hbar^2}{m} \psi_R(0) \psi'_R(0) \quad (3.12)$$

Die WKB Wellenfunktion lautet nun im klassisch verbotenen Bereich mit der Ersetzung $p \rightarrow i|p|$ [Raz]

$$\psi_R(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^a |p(\xi)| d\xi\right), \quad |p(x)| = \sqrt{2m[V(x) - E]}. \quad (3.13)$$

Dabei ist a ein klassischer Umkehrpunkt und ω die Frequenz der Bewegung in einer Potentialmulde. Sie lässt sich folgendermaßen abschätzen. Die Potentialmulde in der Nähe des Minimums bei x_0 wird durch ein harmonisches Oszillatortpotential $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ abgeschätzt. Durch zweimaliges Ableiten erhält man

$$\omega \approx \sqrt{\frac{V''(x_0)}{m}}. \quad (3.14)$$

Als Ableitung von $\psi_R(x)$ erhält man

$$\psi'_R(x) = \left[\frac{|p(x)|}{\hbar} - \frac{2mV'(x)}{4|p(x)|} \right] \psi_R(x). \quad (3.15)$$

Nähert man noch die Grundzustandsenergie E durch das Potential am Minimum $V(x_0)$, so erhält man die Energieaufspaltung in WKB-Näherung

$$\Delta E = \frac{\hbar}{\pi} \sqrt{\frac{V''(x_0)}{m}} \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^a \sqrt{2m[V(x) - V(x_0)]} dx\right). \quad (3.16)$$

3.4 Die Doppelmulde und ihr SUSY-Partner

Um die Energieaufspaltung mittels Supersymmetrie zu bestimmen, wird zunächst die Grundzustandswellenfunktion benötigt [Kal]. Ein plausibler Ansatz ist die Überlagerung zweier Gauß-Funktionen,

$$\psi_0(x) = e^{-\alpha(x-x_0)^2} + e^{-\alpha(x+x_0)^2} = 2e^{-\alpha(x^2+x_0^2)} \cosh 2\alpha x x_0. \quad (3.17)$$

Daraus folgt bereits das Superpotential

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi'_0(x)}{\psi_0(x)} = \frac{2\alpha\hbar}{\sqrt{2m}} (x - x_0 \tanh 2\alpha x x_0) \quad (3.18)$$

3 DOPPELMULDENPOTENTIAL UND TUNNELEFFEKT

und die beiden Partnerpotentiale

$$V_{1,2}(x) = \frac{2\hbar^2\alpha^2}{m} [x - x_0 \tanh 2\alpha x_0 x]^2 \mp \frac{\hbar^2\alpha}{m} \left[1 - \frac{2\alpha x_0^2}{\cosh^2 2\alpha x_0 x} \right]. \quad (3.19)$$

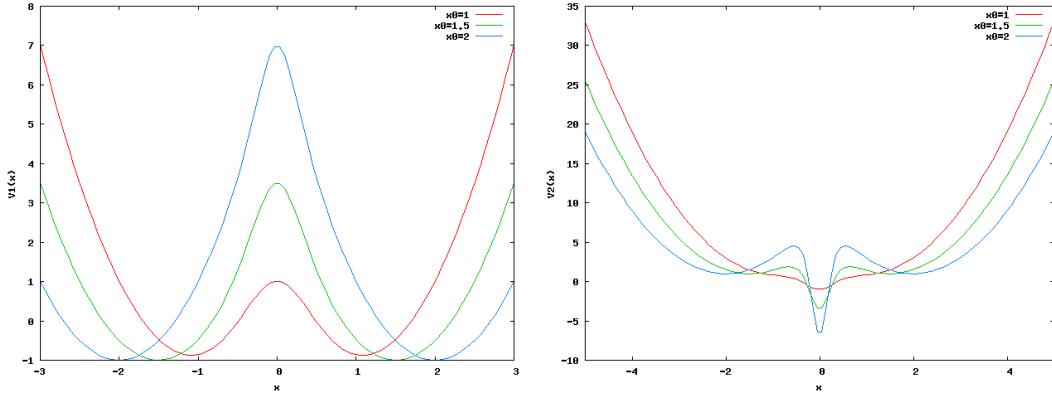


Abbildung 8: Links das Doppelmuldenpotential für verschiedene Werte von x_0 , also verschiedene Tiefen. Rechts die zugehörigen Partnerpotentiale. Es wurde $m = \hbar = \alpha = 1$ gewählt.

Das Partnerpotential zum Doppelmuldenpotential V_1 hat also nur eine einzelne Mulde. Dies gilt aber nur für kleine x_0 . Im Fall $x_0 \rightarrow \infty$ erhält man nämlich

$$V_{1,2}(x) = \frac{2\hbar^2\alpha^2}{m} (|x| - x_0)^2 \mp \frac{\hbar^2\alpha}{m}, \quad (3.20)$$

zwei Doppelmuldenpotentiale. Die Tiefe der Potentiale $D := V_{1,2}(0) - V_{1,2}(x_0) = 2(\hbar\alpha x_0)^2/m$ wächst mit x_0 . In der WKB-Näherung erhält man für dieses Potential aus (3.17), (3.12) die Energieaufspaltung

$$\Delta E = \frac{4\hbar^2}{m} \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \alpha x_0 \exp(-2\alpha x_0^2). \quad (3.21)$$

Nun zur Supersymmetrie. Nach Definition verschwindet die Grundzustandsenergie von $V_1(x)$, $E_0^{(1)} = 0$, und nach (2.14) ist die Energie des ersten angeregten Zustands gleich dem Grundzustand des Partnerpotentials, $E_1^{(1)} = E_0^{(2)}$. Damit lautet die Energieaufspaltung

$$\Delta E = E_0^{(2)}. \quad (3.22)$$

Diese Energie lässt sich mit dem Ritz'schen Variationsverfahren und einer Gaußfunktion als Testfunktion bestimmen. Da das Partnerpotential nur aus einer einzelnen

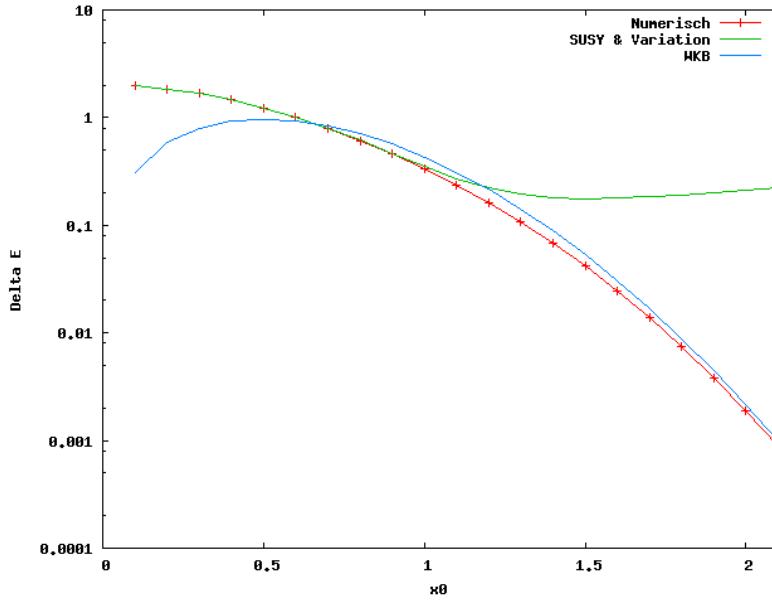


Abbildung 9: Vergleich der Ergebnisse für die Tunnelaufspaltung beim Doppelmuldenpotential. Die Aufspaltung wurde für verschiedene Werte von x_0 mit der WKB-Näherung, mit Ausnutzung von Supersymmetrie und numerisch bestimmt. Das numerische Ergebnis wurde mit dem Numerov-Algorithmus bestimmt. Es wurde $\hbar = m = \alpha = 1$ gewählt. Die y -Achse ist logarithmisch geplottet.

Mulde besteht und man nur den Grundzustand benötigt, erwartet man bessere Ergebnisse als bei der Variation für den ersten angeregten Zustand der Doppelmulde. Dies gilt allerdings wegen (3.20) nur für flache Potentiale.

In Abbildung 9 sieht man wie erwartet, dass für kleine x_0 und damit für flache Potentiale die Näherung das exakte Ergebnis reproduziert, während die WKB-Näherung versagt. Für große x_0 wird die WKB-Näherung besser, während die SUSY-Näherung versagt.

3.5 Regularisierung der Grundzustandswellenfunktion

Bei tiefen Doppelmuldenpotentialen erwartet man eine sehr kleine Energieaufspaltung, $\Delta E \approx 0$. Daraus folgt mit (3.22), dass dann auch die Grundzustandsenergie von \hat{H}_2 ungefähr Null ist [Keu]. Das kann man auch in Abbildung 9 sehen. Dies kann man ausnutzen, um eine Näherung für den Grundzustand von \hat{H}_2 zu bestimmen.

Aus $\hat{B}\psi_0(x) = 0$ folgt $\hat{B}^\dagger(1/\psi_0(x)) = 0$. Mit der Quotientenregel erhält man

$$\hat{B}^\dagger \frac{1}{\psi_0(x)} = \left(-\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W(x) \right) \frac{1}{\psi_0(x)} = \frac{1}{\psi_0^2(x)} \underbrace{\left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \psi_0'(x) + W(x) \psi_0(x) \right)}_{=\hat{B}\psi_0(x)=0} = 0. \quad (3.23)$$

Da ein Grundzustand keine Knoten besitzt, ist der obige Ausdruck für alle $x \in \mathbb{R}$ definiert. Mit (2.6) folgt damit auch aus $\hat{H}_1\psi_0(x) = 0$, dass $\hat{H}_2(1/\psi_0(x)) = 0$ gilt. Eine notwendige Bedingung dafür, dass eine Funktion normierbar ist, ist dass sie im Unendlichen verschwindet. Daher können $\psi_0(x)$ und $1/\psi_0(x)$ nicht gleichzeitig normierbar sein. Dies lässt sich dadurch beheben, dass man eine neue Funktion $\phi(x)$ einführt, mit

$$\phi(x) = \begin{cases} I(x)/\psi_0(x) & \text{für } x > 0 \\ I(-x)/\psi_0(x) & \text{für } x < 0 \end{cases}, \quad (3.24)$$

$$I(x) = \int_x^\infty |\psi_0(\xi)|^2 d\xi. \quad (3.25)$$

Im Ursprung ist $\phi(0) = (2\psi_0(0))^{-1}$. Damit ist $\phi(x)$ auf ganz \mathbb{R} stetig. Die Ableitung von $\phi(x)$ lautet

$$\phi'(x) = \begin{cases} -\psi_0(x) - (\psi'(x)/\psi(x))\phi(x) & \text{für } x > 0 \\ \psi_0(x) - (\psi'(x)/\psi(x))\phi(-x) & \text{für } x < 0 \end{cases} \quad (3.26)$$

und macht an der Stelle $x = 0$ einen Sprung,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\phi'(0 + \epsilon) - \phi'(0 - \epsilon)] = -2\psi_0(0). \quad (3.27)$$

Die Funktion $\phi(x)$ ist normierbar, da

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \phi(x) = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\mp\psi_0^2(x)}{\psi_0'(x)} = \pm \frac{\sqrt{m}}{\hbar} \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\psi_0(x)}{W(x)} = 0 \quad (3.28)$$

gilt. Dabei wurde die Regel von l'Hospital zweimal verwendet und, dass das Superpotential bei exakter Supersymmetrie im Unendlichen nicht verschwindet. Nun ist zu zeigen, dass $\phi(x)$ die Schrödinger-Gleichung $\hat{H}_2\phi(x) = 0$ für alle $x \neq 0$ erfüllt. Der Fall

$x = 0$ wird danach behandelt. Es gilt zunächst für $x > 0$

$$\begin{aligned}\hat{B}^\dagger \phi(x) &= \left[W(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} \right] \frac{I(x)}{\psi_0(x)}, \\ &= I(x) \left[W(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} \right] \frac{1}{\psi_0(x)} - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{I'(x)}{\psi_0(x)}, \\ &= I(x) \hat{B}^\dagger \frac{1}{\psi_0(x)} - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{1}{\psi_0(x)} \frac{d}{dx} \int_x^\infty \psi_0^2(\xi) d\xi,\end{aligned}\quad (3.29)$$

$$\hat{B}^\dagger \phi(x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \psi_0(x). \quad (3.30)$$

In (3.29) wurde verwendet, dass $\hat{B}^\dagger(1/\psi_0) = 0$ gilt. Durch Anwenden von \hat{B} auf (3.30) erhält man schließlich

$$\hat{H}_2 \phi(x) = \hat{B} \hat{B}^\dagger \phi(x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \hat{B} \psi_0(x) = 0. \quad (3.31)$$

Analog erhält man das Gleiche für $x < 0$. Für $x = 0$ betrachtet man den Hamilton-operator

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_2 - \frac{2\hbar^2}{m} \psi_0^2(0) \delta(x). \quad (3.32)$$

Für $x \neq 0$ sind \hat{H}_2 und \hat{H}_0 identisch. Durch die δ -Funktion wird der Sprung von $\phi'(x)$ berücksichtigt. Das zeigt man, indem man die Schrödinger-Gleichung

$$\phi''(x) + \left[2\psi_0^2(0) \delta(x) - \frac{2m}{\hbar^2} V_2(x) \right] \phi(x) = 0 \quad (3.33)$$

von $-\epsilon$ bis ϵ integriert. Man erhält

$$\phi'(\epsilon) - \phi'(-\epsilon) = -2\psi_0^2 \phi(0) + \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} V_2(x) \phi(x) dx \quad (3.34)$$

und durch Bildung des Grenzwertes $\epsilon \rightarrow 0$ folgt (3.27). $\phi(x)$ ist also Eigenfunktion von \hat{H}_0 zum Eigenwert $E = 0$. Die Energieaufspaltung von \hat{H}_2 lässt sich nun bestimmen, indem man \hat{H}_2 schreibt als

$$\hat{H}_2 = \hat{H}_0 + \delta \hat{H} \quad \text{mit} \quad \delta \hat{H} = \frac{2\hbar^2}{m} \psi_0^2 \delta(x) \quad (3.35)$$

als kleiner Störung. Die Störung ist umso kleiner, je größer die Potentialbarriere ist, da die Wellenfunktion mitten in der Barriere die Form $\psi_0(0) \propto e^{-x_0^2}$ hat. In erster

Ordnung Störungstheorie erhält man für die Grundzustandsenergie $E_0^{(2)} = E + E'$. Mit der ungestörten Lösung $E = 0$ und der Korrektur

$$E' = \frac{\langle \phi | \delta \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^2(x) \delta \hat{H} dx = \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} \frac{\hbar^2}{2m}. \quad (3.36)$$

Mit

$$\langle \phi | \phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^2(x) dx = 2 \int_0^{\infty} \phi^2(x) dx \quad (3.37)$$

und (3.22) erhält man für die Energieaufspaltung

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{4m} \left[\int_0^{\infty} \phi^2(x) dx \right]^{-1}. \quad (3.38)$$

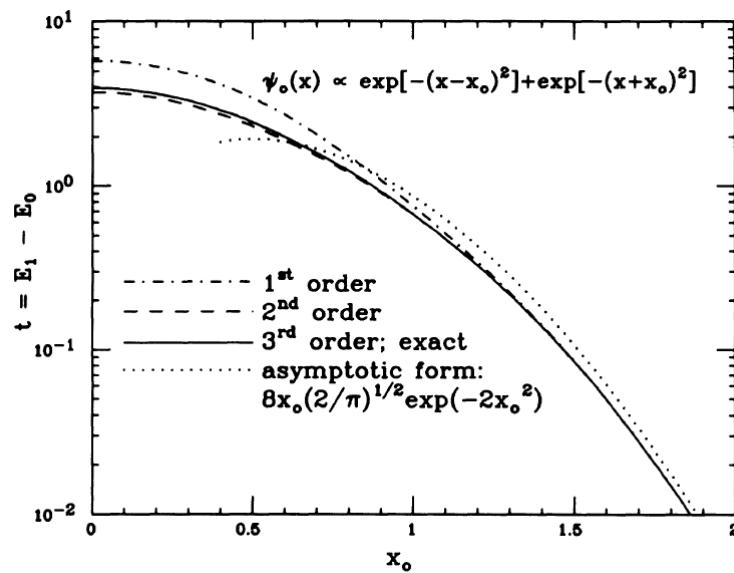


Abbildung 10: Vergleich der berechneten Energieaufspaltung aus der WKB-Näherung, der Regularisierung des Grundzustandes des Partnerpotentials und des numerischen Ergebnisses [Keu]. Hier wurde die Störungsreihe sogar bis zur 3. Ordnung fortgesetzt. Es wurde $\hbar = 2m = 1$ gesetzt.

Man sieht in Abbildung 10, dass die Näherung für große x_0 schneller konvergiert (in der ersten Ordnung) als die WKB-Näherung, da bei $x_0 = 1.5$ bereits die Näherung mit dem exakten Ergebnis nahezu übereinstimmt.

4 Diskussion

In dieser Arbeit wurde gezeigt, wie sich die nichtrelativistische Quantenmechanik um Supersymmetrie erweitern lässt. Dazu wurde der Hamiltonoperator faktorisiert und sein Spektrum mit dem eines Partnersystems in Verbindung gesetzt. Es wurde kurz auf die SUSY-Algebra und einige formale Eigenschaften der Supersymmetrie eingegangen, aus denen die Eigenschaften des Formalismus folgen.

Danach wurde gezeigt, wie sich die WKB-Näherung zunächst ohne Bezug zum Doppelmuldenpotential als SWKB-Näherung verbessern lässt, um dann besondere Näherungsmethoden für die Niveaupaltung des Doppelmuldenpotentials herzuleiten und mit dem WKB-Ergebnis zu vergleichen.

Die erste Näherungsmethode ist recht naheliegend. Man bestimmt das Partnerpotential der Doppelmulde, das bis zu einer bestimmten Tiefe des Doppelmuldenpotentials aus nur einer Mulde besteht. Man nutzt weiter aus, dass die Grundzustandsenergie bei exakter Supersymmetrie verschwindet und muss nur noch die Grundzustandsenergie des Partnerpotentials bestimmen, die man mit einer Gauß-Funktion als Ansatz so lange gut bestimmen kann, wie das Partnerpotential eine Einzelmulde ist. Allerdings ist die Variation der Energie trotz des leichten Ansatzes nicht ohne Computer durchzuführen. Das Ergebnis ist für flache Doppelmulden sehr gut und wird mit steigender Tiefe schlechter.

Bei der zweiten Näherung wurde angenommen, dass die Energieaufspaltung sehr klein ist, was für tiefe Doppelmulden sehr gut erfüllt ist. Man bekommt dann sehr leicht eine Lösung für den Grundzustand des Partnerpotentials, die aber nicht normierbar ist. Daraus lässt sich dann eine geeignete Lösung konstruieren. Das Ergebnis für die Energieaufspaltung ist wieder nur numerisch zu bestimmen, dafür ist es bei tiefen Doppelmulden besser als die WKB-Näherung.

Durch Supersymmetrie ließen sich also bessere Näherungsergebnisse als mit der herkömmlichen WKB-Näherung erzielen. Ein weiterer Vorteil der SUSY-Näherungen ist, dass die Verallgemeinerung auf asymmetrische Doppelmuldenpotentiale naheliegender ist. Die erste Näherung lässt sich genauso verwenden, solange das Potential nicht zu asymmetrisch ist und das Partnerpotential nur aus einer Mulde besteht, und für die zweite Methode wird die Verallgemeinerung im Anhang C gezeigt. Bei der Herleitung der WKB-Näherung wurde in (3.4) implizit vorausgesetzt, dass das Doppelmuldenpotential symmetrisch ist. In [Boy] wird die WKB-Näherung mithilfe von Pfadintegralen auf asymmetrische Doppelmulden angewandt.

A WKB-Näherung

In der WKB-Näherung, nach Wentzel, Kramers und Brillouin, wird die Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \phi(x) = E\phi(x) \quad (\text{A.1})$$

nach Potenzen von \hbar entwickelt [Fli]. Zunächst wird in die Schrödinger-Gleichung der Ansatz

$$\phi(x) = \exp \left(\frac{iS(x)}{\hbar} \right), \quad S(x) \in \mathbb{C} \quad (\text{A.2})$$

eingesetzt. Dies führt zur Differentialgleichung

$$S'(x)^2 = 2m [E - V(x)] + i\hbar S''(x). \quad (\text{A.3})$$

Das ' bezeichnet eine Ableitung nach x . Nun entwickelt man $S(x)$ nach Potenzen von \hbar/i ,

$$S(x) = S_0(x) + \frac{\hbar}{i} S_1(x) + \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 S_2(x) + \dots, \quad (\text{A.4})$$

setzt dies in (A.3) ein und sortiert die Terme nach Potenzen von \hbar . Bis zur Ordnung $\mathcal{O}(\hbar)$ erhält man

$$S'_0(x)^2 = 2m [E - V(x)] =: p^2(x), \quad \mathcal{O}(\infty) \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{2}{i} S'_0(x) S'_1(x) = i S''_0(x). \quad \mathcal{O}(\hbar) \quad (\text{A.6})$$

Gleichung (A.5) ist die zeitunabhängige Hamilton-Jakobi-Gleichung. Für $\hbar \rightarrow 0$ erhält man also aus (A.3) das klassische Ergebnis, daher wird diese Näherung auch semiklassische Näherung genannt. Der Einfluss der Terme $\mathcal{O}(\hbar^\epsilon)$ wird vernachlässigt. Aus (A.5) erhält man

$$S_0(x) = \pm \int_{x_0}^x p(\xi) d\xi. \quad (\text{A.7})$$

Damit erhält man aus (A.6)

$$S'_1(x) = -\frac{1}{2} \frac{S''_0(x)}{S'_0(x)} = \frac{1}{2} \frac{|S'_0(x)|'}{|S'_0(x)|}, \quad (\text{A.8})$$

$$\Rightarrow S_1(x) = \ln \sqrt{|S'_0(x)|} + const. \quad (\text{A.9})$$

B NUMERISCHES LÖSEN DER SCHRÖDINGERGLEICHUNG

Dabei wurde in (A.8) ausgenutzt, dass $S'_0(x)$ immer nur reell oder imaginär ist, und man deswegen die Phase ± 1 bzw. $\pm i$ in Zähler und Nenner kürzen kann. Nun setzt man $S \approx S_0 + \hbar/i \cdot S_1$ in (A.2) ein und erhält für die Wellenfunktion die beiden linear unabhängigen Näherungslösungen

$$\phi_{\pm}(x) = \frac{\text{const.}}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(\xi) d\xi\right). \quad (\text{A.10})$$

Die allgemeine Lösung ist dann eine Linearkombination beider Lösungen. Man sieht, dass die Lösung für $p(x) = 0$ singulär wird, also für die klassischen Umkehrpunkte mit $E = V(x)$. Eine Möglichkeit die Lösungen in den klassisch erlaubten mit denen in den klassisch verbotenen Regionen zu verbinden, ist das Potential in der Nähe der Umkehrpunkte zu linearisieren. Damit erhält man die sogenannte Bohr-Sommerfeldsche Quantisierungsregel [Raz]

$$\int_a^b \sqrt{2m [E_n - V(x)]} dx = \hbar\pi \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (\text{A.11})$$

mit der man die Eigenenergien E_n näherungsweise berechnen kann. a und b sind die klassischen Umkehrpunkte.

B Numerisches Lösen der Schrödingergleichung

Wenn man Näherungsmethoden für bestimmte Probleme entwickelt, dann will man die Ergebnisse dieser mit den exakten Lösungen vergleichen. In diesem Abschnitt soll erläutert werden, wie man beim numerischen Lösen der Schrödingergleichung

$$\psi''(x) + F(x)\psi(x) = 0, \quad \text{mit } F(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x)), \quad (\text{B.1})$$

vorgeht [Schn]. Zunächst entwickelt man $\psi(x \pm h)$ bis zur 4. Ordnung nach h [Schn]

$$\psi(x \pm h) = \psi(x) \pm h\psi'(x) + \frac{h^2}{2}\psi''(x) \pm \frac{h^3}{6}\psi'''(x) + \frac{h^4}{24}\psi^{(iv)}(x) + \mathcal{O}(\langle \nabla \rangle). \quad (\text{B.2})$$

Daraus folgt dann

$$\psi(x + h) + \psi(x - h) = 2\psi(x) + h^2\psi''(x) + \frac{h^4}{12}\psi^{(iv)}(x) + \mathcal{O}(\langle \rangle), \quad (\text{B.3})$$

$$\Leftrightarrow \psi(x + h) = 2\psi(x) + h^2\psi''(x) - \psi(x - h) + \mathcal{O}(\langle \Delta \rangle), \quad (\text{B.4})$$

$$= (2 - h^2 F(x))\psi(x) - \psi(x - h) + \mathcal{O}(\langle \Delta \rangle). \quad (\text{B.5})$$

Dabei wurde der Term proportional zu h^4 vernachlässigt und die Schrödingergleichung (B.1) eingesetzt. Damit lässt sich bei Vorgabe von zwei Werten die Schrödingergleichung mit einer lokalen Fehlerordnung von h^4 integrieren. Der Fehler lässt sich sogar auf h^6 reduzieren. Dazu wendet man zunächst den Differentialoperator

$$1 + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dx^2} \quad (B.6)$$

auf (B.1) an und erhält

$$\psi''(x) + \frac{h^2}{12} \psi^{(iv)}(x) + F(x)\psi(x) + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dx^2}(F(x)\psi(x)) = 0. \quad (B.7)$$

Die zweiten Ableitungen der ersten beiden Terme werden nach (B.3) bis zur Ordnung h^4 bestimmt. Die zweite Ableitung von dem dritten Summanden wird bis zur Ordnung h^2 bestimmt. Wegen des Vorfaktors h^2 ist die Fehlerordnung ebenfalls h^4 . Auflösen nach $\psi(x + h)$ liefert dann

$$\psi(x + h) = \frac{2\psi(x) - \psi(x - h) - \frac{h^2}{12}(10F(x)\psi(x) + F(x - h)\psi(x - h))}{1 + \frac{h^2}{12}F(x + h)} + \mathcal{O}(\langle \rangle). \quad (B.8)$$

Dies ist der sogenannte Numerov-Algorithmus. Mit dieser Formel lässt sich die Schrödingergleichung zwar lösen, die Eigenenergien sind aber weiterhin unbekannt. Um diese zu bestimmen, nutzt man aus, dass Eigenzustände normierbar sein müssen. Dies impliziert, dass sie im Unendlichen verschwinden. Dies ist auf Computern nicht realisierbar. Statt dessen wählt man ein R , dass sich weit im klassisch verbotenen Bereich befindet und fordert $\psi(\pm R) = 0$. Im Prinzip fügt man damit dem Potential unendliche Potentialwälle bei $\pm R$ hinzu, die aber für große R keinen Einfluss auf das Ergebnis haben.

Außerdem kann man den Knotensatz ausnutzen, der besagt, dass der n -te Eigenzustand n Nullstellen (Knoten) im Endlichen hat [Nol]. Man kann also beim Lösen die Nullstellen zählen und so den gesuchten Zustand eingrenzen. Die Eigenenergien lassen sich dann durch eine Intervallschachtelung bestimmen, indem man noch ausnutzt, dass für einen Schätzwert E und die Eigenenergie E_n gilt

- $E > E_n \Rightarrow \psi(R) < 0$
- $E < E_n \Rightarrow \psi(R) > 0$

Man kann nun $\psi(-R) = 0$ und $\psi(-R + h)$ beliebig wählen und die Energie so variieren, dass die $\psi(R)$ möglichst klein wird. Methoden, die nach diesem Prinzip ablaufen, bezeichnet man als Shooting-Methoden. Wegen Rechnungenauigkeiten wird die Wellenfunktion aber schließlich doch divergieren. Dies ist für den ersten angeregten Zustand im Doppelmuldenpotential in Abbildung 11 dargestellt.

Man sieht, dass der Zustand genau einen Knoten hat und auf Null abfällt, um dann am rechten Rand doch zu divergieren.

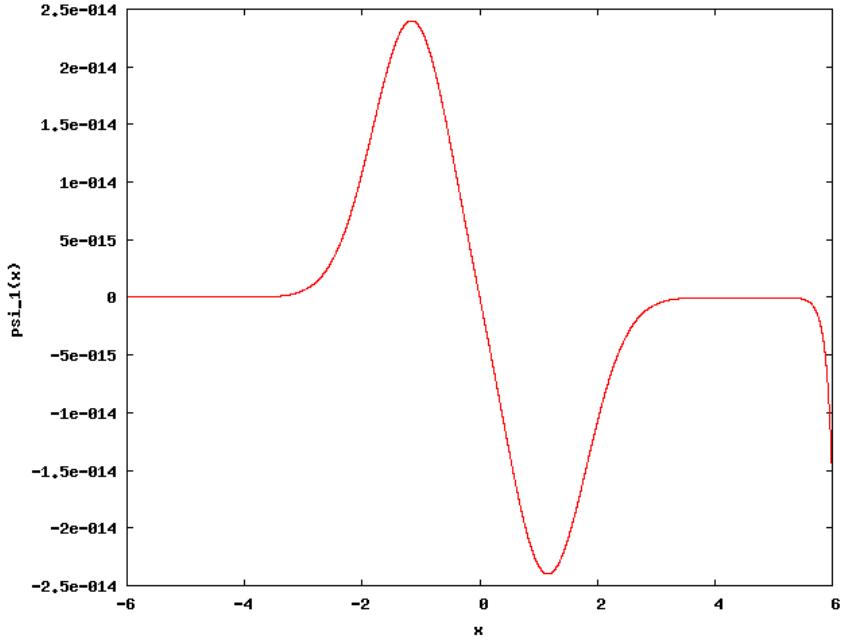


Abbildung 11: Der erste angeregte Zustand im Doppelmuldenpotential.

C Asymmetrische Doppelmuldenpotentiale

C.1 Die Doppelmulde und ihr SUSY-Partner

Für den Grundzustand der Wellenfunktion macht man beim asymmetrischen Doppelmuldenpotential den Ansatz [Gan]

$$\psi_0(x) = e^{-a(x+x_0)^2} + e^{-b(x-x_0)^2}, \quad (\text{C.1})$$

dabei sind a, b, x_0 Variationsparameter, die an das gegebene Potential anzupassen sind. Der Fall $a = b$ entspricht einem symmetrischen Doppelmuldenpotential. Aus diesem Grundzustand erhält man das Superpotential

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi'_0(x)}{\psi_0(x)} = 2 \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{a(x+x_0)e^{-a(x+x_0)^2} + b(x-x_0)e^{-b(x-x_0)^2}}{e^{-a(x+x_0)^2} + e^{-b(x-x_0)^2}}. \quad (\text{C.2})$$

C ASYMMETRISCHE DOPPELMULDENPOTENTIALE

Daraus folgen die Partnerpotentiale $V_{1,2}(x) = W^2(x) \mp \hbar/\sqrt{m}W'(x)$,

$$V_1(x) = \frac{\hbar^2 a}{m} \frac{[2a(x+x_0)^2 - 1] e^{-a(x+x_0)^2} + b[2b(x-x_0)^2 - 1] e^{-b(x-x_0)^2}}{e^{-a(x+x_0)^2} + e^{-b(x-x_0)^2}}, \quad (\text{C.3})$$

$$V_2(x) = \frac{4\hbar^2}{m} \left[\frac{a(x+x_0)e^{-a(x+x_0)^2} + b(x-x_0)e^{-b(x-x_0)^2}}{e^{-a(x+x_0)^2} + e^{-b(x-x_0)^2}} \right]^2 - \frac{\hbar^2 a}{m} \frac{[2a(x+x_0)^2 - 1] e^{-a(x+x_0)^2} + b[2b(x-x_0)^2 - 1] e^{-b(x-x_0)^2}}{e^{-a(x+x_0)^2} + e^{-b(x-x_0)^2}}. \quad (\text{C.4})$$

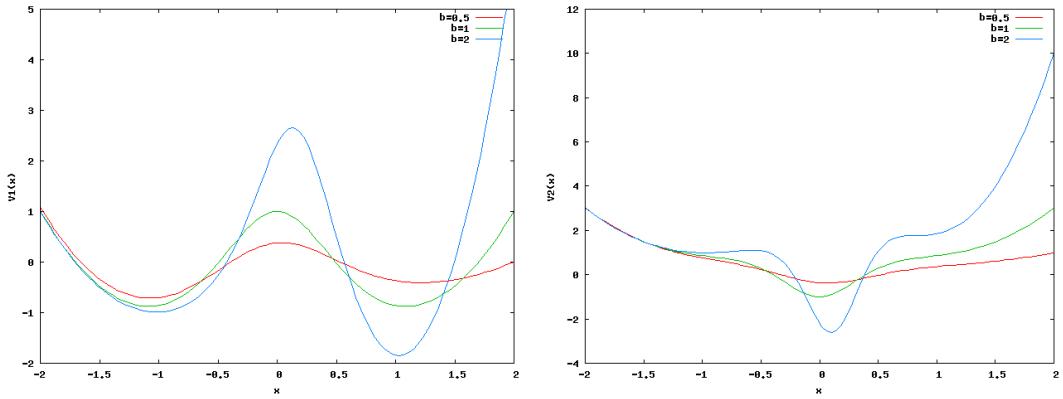


Abbildung 12: Links das asymmetrische Doppelmuldenpotential für verschiedene Werte von b und $a = 1$. b fungiert als Parameter für die Asymmetrie. Rechts die zugehörigen Partnerpotentiale. Es wurde $m = \hbar = 1$ gewählt.

Man sieht in Abbildung 12, dass für kleine b das Partnerpotential aus nur einer Mulde besteht und man deswegen eine Gauß-Funktion als Testfunktion ansetzen kann.

C.2 Regularisierung des Grundzustands

Bei der Regularisierung des Grundzustands des Partnerpotentials argumentiert man analog zum symmetrischen Fall, dass $\hat{H}_2 1/\psi_0(x) = 0$ ist, $\psi_0(x)$ und $1/\psi_0(x)$ nicht gleichzeitig normierbar sind und wählt den Ansatz

$$\phi(x) = \begin{cases} \frac{\int_x^\infty \psi_0^2(\xi) d\xi}{2I_+ \psi_0(x)} & \text{für } x > \bar{x} \\ \frac{\int_{-\infty}^x \psi_0^2(\xi) d\xi}{2I_- \psi_0(x)} & \text{für } x < \bar{x} \end{cases}, \quad (\text{C.5})$$

$$I_+ = \int_{\bar{x}}^\infty \psi_0^2(\xi) d\xi, \quad I_- = \int_{-\infty}^{\bar{x}} \psi_0^2(\xi) d\xi. \quad (\text{C.6})$$

Dabei ist \bar{x} ein beliebiger Ort, von dessen Wahl aber die Güte der Näherung abhängt. Die Ableitung von $\phi(x)$ lautet

$$\phi'(x) = \begin{cases} \frac{1}{2I_+} \left(-\psi_0(x) - \frac{\psi'_0(x)}{\psi_0^2(x)} \int_x^\infty \psi_0^2(\xi) d\xi \right) & \text{für } x > \bar{x} \\ \frac{1}{2I_-} \left(\psi_0(x) - \frac{\psi'_0(x)}{\psi_0^2(x)} \int_{-\infty}^x \psi_0^2(\xi) d\xi \right) & \text{für } x < \bar{x} \end{cases} \quad (\text{C.7})$$

und hat einen Sprung bei $x = \bar{x}$,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\phi'(\bar{x} + \epsilon) - \phi'(\bar{x} - \epsilon)] = - \left(\frac{1}{I_+} + \frac{1}{I_-} \right) \frac{\psi_0(\bar{x})}{2} = - \frac{\psi_0(\bar{x})}{2I}, \quad \text{mit} \quad \frac{1}{I} = \frac{1}{I_+} + \frac{1}{I_-} \quad (\text{C.8})$$

Wie im symmetrischen Fall zeigt man, dass $\hat{H}_2\phi(x) = 0$ für alle $x \neq \bar{x}$ ist. Damit ist $\phi(x)$ Eigenfunktion zum singulären Hamiltonoperator

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_2 - \frac{\hbar^2}{2mI} \psi_0^2(\bar{x}) \delta(x - \bar{x}). \quad (\text{C.9})$$

Die Energieaufspaltung erhält man wieder dadurch, dass man \hat{H}_2 schreibt als

$$\hat{H}_2 = \hat{H}_0 + \delta\hat{H} \quad \text{mit} \quad \delta\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2mI} \psi_0^2(\bar{x}) \delta(x - \bar{x}) \quad (\text{C.10})$$

als kleiner Störung. Die Störung ist umso kleiner, je kleiner $\psi(\bar{x})$ ist. Die ist insbesondere in der Potentialbarriere der Fall, daher wählt man \bar{x} als das Maximum des Potentials. In erster Ordnung Störungstheorie erhält man dann für die Energieaufspaltung

$$\Delta E = \frac{\langle \phi | \delta\hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} \frac{\hbar^2}{2mI} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^2(x) \psi_0^2(\bar{x}) \delta(x - \bar{x}) dx = \frac{\hbar^2}{8mI} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \phi^2(x) dx \right]^{-1}. \quad (\text{C.11})$$

Man sieht in Abbildung 13, dass das Ergebnis aus der Regularisierung des Grundzustands des Partnerpotentials viel besser ist als die WKB-Methode⁴.

⁴Die WKB-Näherung, die in [Gan] verwendet wurde, ist nicht die in dieser Arbeit hergeleitete, sondern eine an asymmetrische Doppelmuldenpotentiale angepasste, auf die nicht weiter eingegangen werden soll.

LITERATUR

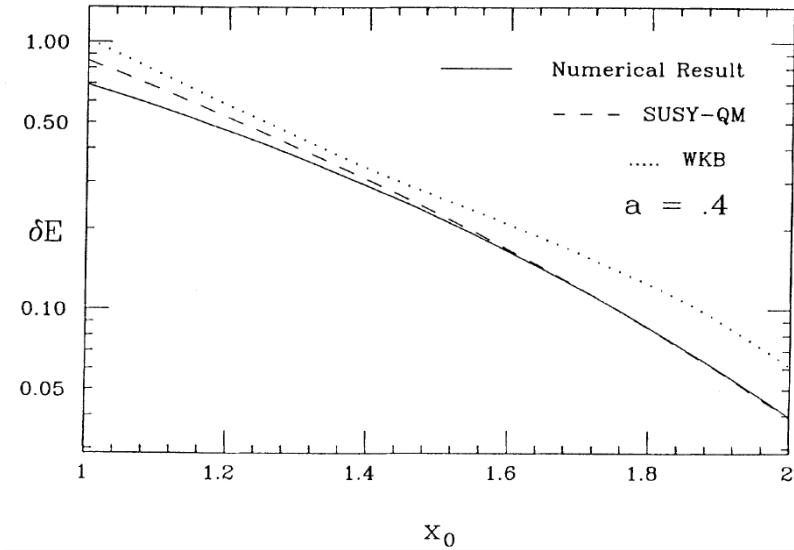


Abbildung 13: Vergleich der Aufspaltungen aus einer WKB-Näherung, dem numerischen Ergebnis und der in diesem Abschnitt vorgestellten Methode [Gan]. Hier ist $\hbar = 2m = 1$, $b = 1$ und $a = 0.4$.

Literatur

- [Boy] D. Boyanovsky, R. Willey, and R. Holman, „Quantum mechanical metastability: When and why?“. Nucl. Phys. 8376, 599 (1992)
- [Bra] B. H. Bransden, C. J. Joachain, „Physics of Atoms and Molecules“. Pearson 2011
- [Coo] F. Cooper, A. Khare, U. Sukhatme, „Supersymmetry and Quantum Mechanics“. Physics Reports 251 267-385 (1995)
- [Fli] T. Fließbach „Quantenmechanik“. Spektrum 2008
- [Gen] L. E. Gendenshtein, I. V. Krive, „Supersymmetry in Quantum Mechanics“. Usp. Fiz. Nauk 146, 553-590 (1985)
- [Gan] A. Gangopadhyaya, P. K. Panigrahi, U. P. Sukhatme, „Supersymmetry and tunneling in an asymmetric double well“. Phys. Rev. A 47, 2720-2724 (1993)
- [Jaf] A. Jaffe, A. Lesniewski, M. Lewenstein, „Ground state structure in Supersymmetric Quantum Mechanics“. Annals of Physics 178, 313-329 (1987)
- [Jun] G. Junker, „Supersymmetric methods in Quantum and Statistical Physics“. Springer 1996

- [Kal] H. Kalka, G. Soff, „Supersymmetrie“. Teubner 1997
- [Keu] W.-Y. Keung, E. Kovacs, U. P. Sukhatme, „Supersymmetry and Double-Well Potentials“. Phys. Rev. Lett. 60, 41-44 (1988)
- [Mün] G. Münster, „Quantentheorie“. De Gruyter 2006
- [Nic] H. Nicolai, „Supersymmetry an spin Systems“. J. Phys. A: Math. Gen., Vol. 9, No. 9, 1976.
- [Nol] W. Nolting, „Quantenmechanik - Grundlagen“. Springer 2009
- [Raz] M. Razavy, „Quantum theory of tunneling“. World Scientific 2003
- [Schn] J. Schnakenberg, „Algorithmen in der Quantentheorie und statistischen Physik“. Zimmermann-Neufang 1995
- [Schw] F. Schwabl, „Quantenmechanik“. Springer 2002
- [Wie] B. Wiesmann, „Chirale Moleküle - Zur Erklärung der Stabilität optischer Isomere aus fundamentalen Wechselwirkungen“. Dissertation, Uni Regensburg 2000
- [Wit] E. Witten, „Dynamical breaking of Supersymmetry“. Nuclear Physics B185 (1981) 513-554
- [Zum] B. Zumino, „Supersymmetry now and then“. Fortschr. Phys. 54, No. 2-3, 199-204 (2006)

Abbildungsverzeichnis

1	Das Doppelmuldenpotential zur Erklärung der Chiralität von Molekülen. Die Zustände in den Mulden entsprechen der links- bzw. rechts-händigen Konfiguration. Aus [Wie]	2
2	Die beiden Konfigurationen des Ammoniak und das zugehörige Doppelmuldenpotential. Aus [Bra]	3
3	Die Entartung der Spektren von V_1 und V_2 . Entnommen aus [Coo].	6
4	Der Potentialtopf und sein SUSY-Partner. Entnommen aus [Coo]	7
5	Schematische Darstellung der Spektren der Partnerpotentiale bei exakter und gebrochener SUSY. Entnommen aus [Kal]	10
6	Der klassische Phasenraum für die Bewegung eines Teilchens im Doppelmuldenpotential	14
7	Links: Ein Doppelmuldenpotential mit unendlicher Potentilabarriere. Rechts: Ein Doppelmuldenpotential mit endlicher Barriere. Entnommen aus [Kal]	15

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

8	Links das Doppelmuldenpotential für verschiedene Werte von x_0 , also verschiedene Tiefen. Rechts die zugehörigen Partnerpotentiale. Es wurde $m = \hbar = \alpha = 1$ gewählt.	18
9	Vergleich der Ergebnisse für die Tunnelaufspaltung beim Doppelmuldenpotential. Die Aufspaltung wurde für verschiedene Werte von x_0 mit der WKB-Näherung, mit Ausnutzung von Supersymmetrie und numerisch bestimmt. Das numerische Ergebnis wurde mit dem Numerov-Algorithmus bestimmt. Es wurde $\hbar = m = \alpha = 1$ gewählt. Die y -Achse ist logarithmisch geplottet.	19
10	Vergleich der berechneten Energieaufspaltung aus der WKB-Näherung, der Regularisierung des Grundzustandes des Partnerpotentials und des numerischen Ergebnisses [Keu]. Hier wurde die Störungsreihe sogar bis zur 3. Ordnung fortgesetzt. Es wurde $\hbar = 2m = 1$ gesetzt.	22
11	Der erste angeregte Zustand im Doppelmuldenpotential.	27
12	Links das asymmetrische Doppelmuldenpotential für verschiedene Werte von b und $a = 1$. b fungiert als Parameter für die Asymmetrie. Rechts die zugehörigen Partnerpotentiale. Es wurde $m = \hbar = 1$ gewählt.	28
13	Vergleich der Aufspaltungen aus einer WKB-Näherung, dem numerischen Ergebnis und der in diesem Abschnitt vorgestellten Methode [Gan]. Hier ist $\hbar = 2m = 1$, $b = 1$ und $a = 0.4$	30

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit mit dem Titel
Doppelmuldenpotential und Tunneleffekt in der supersymmetrischen Quan-
tenmechanik

selbstständig verfasst habe, und dass ich keine anderen Quellen und Hilfsmittel als
die angegebenen benutzt habe und dass die Stellen der Arbeit, die anderen Werken -
auch elektronischen Medien - dem Wortlaut oder Sinn nach entnommen wurden, auf
jeden Fall unter Angabe der Quelle als Entlehnung kenntlich gemacht worden sind.

Ort, Datum

Semir Vrana