VL12: Kapitel 3.3.1: Zeitevolution für den leicht anharmonischen Oszillator: Collapse and Revivals

Setup

Wir betrachten den quantenmechanischen anharmonischen Oszillator aus dem `week11.pdf` mit Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} \hat{H}_\lambda &= -\tfrac{\hbar^2}{2m}\tfrac{d^2}{dx^2} + \tfrac{m\omega^2}{2}x^2 + \tfrac{\lambda}{4}x^4 \\ &= \hbar\omega\left[\tfrac{1}{2}\left\{-\tfrac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2\right\} + \tfrac{\beta}{4}\xi^4\right] =: \hbar\omega\,\hat{H}_\beta \end{aligned} \tag{1}$$

und dem dimensionslosen Operator[1]

$$\hat{H}_\beta = \tfrac{1}{2}\left\{-\tfrac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2\right\} + \tfrac{\beta}{4}\xi^4 \tag{2}$$

mit

$$\begin{aligned} \xi &= \tfrac{x}{\ell} \\ \ell &= \sqrt{\tfrac{\hbar}{m\omega}} \\ \beta &= \tfrac{\lambda\ell^4}{\hbar\omega} = \tfrac{\lambda\hbar}{m^2\omega^3} \ . \end{aligned}$$

Wir wählen denselben Anfangszustand ψ_0, den wir auch schon bei der Zeitevolution des harmonischen Oszillators betrachten haben. Das war

$$\psi_0(x) = \varphi_0(x-x_0) = \tfrac{1}{\sqrt{\ell}}\,h_0\left(\tfrac{x-x_0}{\ell}\right) = \tfrac{1}{\sqrt{\ell}}\,h_0(\xi-\xi_0) \tag{3}$$

mit der nullten Hermite-Funktion

$$h_0(\xi) = \tfrac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}}\,e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

und

$$\xi_0 = \tfrac{x_0}{\ell} \ .$$

In dem Theorem 3.2.2, das war in dem `week10.pdf`, hatten wir das $h_0(\xi-\xi_0)$ nach den Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators entwickelt, das war die folgende Formel:

$$h_0(\xi-\xi_0) = e^{-\frac{c^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\tfrac{c^n}{\sqrt{n!}}\,h_n(\xi)$$

[1] die Notation ist suboptimal, da wir etwa $\hat{H}_0$ nicht schreiben können, sondern nur $\hat{H}_{\beta=0}$, das ist dann der dimensionslose Operator (2) für $\beta=0$ und $\hat{H}_{\lambda=0}$ ist der dimensionsbehaftete Operator (1) für $\lambda=0$.

mit

$$c \;=\; \tfrac{\xi_0}{\sqrt{2}} \;.$$

Die Zeitevolution des Anfangszustandes ψ_0 unter dem anharmonischen Hamilton-Operator (1) können wir jetzt also folgendermassen schreiben:

$$\begin{aligned} \psi_t(x) \;&=\; \big(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_\lambda t}\,\psi_0\big)(x) \;=\; \big(e^{-i\omega t\hat{H}_\beta}\,\psi_0\big)(x) \\ &=\; \tfrac{1}{\sqrt{\ell}}\,e^{-\frac{c^2}{2}}\,\sum_{n=0}^{\infty}\tfrac{c^n}{\sqrt{n!}}\,\big(e^{-i\omega t\hat{H}_\beta}h_n\big)(\xi) \end{aligned} \tag{4}$$

Dimensionslose und Dimensionsbehaftete Gleichung

Fassen wir vielleicht noch einmal kurz den Zusammenhang zwischen dimensionsbehafteten und dimensionslosen Grössen zusammen: Die dimensionsbehaftete zeitabhängige Schrödinger-Gleichung lautet

$$i\hbar\tfrac{\partial}{\partial t}\,\psi \;=\; \hat{H}_\lambda\,\psi \;=\; \hbar\omega\hat{H}_\beta\,\psi \tag{5}$$

und ist äquivalent zu der dimensionslosen Gleichung, wir teilen (5) einfach durch $\hbar\omega$,

$$i\tfrac{\partial}{\partial(\omega t)}\,\psi \;=\; \hat{H}_\beta\,\psi$$

oder, mit der dimensionslosen Variablen $\tau := \omega t$,

$$i\tfrac{\partial}{\partial\tau}\,\psi \;=\; \hat{H}_\beta\,\psi \tag{6}$$

Im folgenden lösen wir die dimensionslose Gleichung (6) und erhalten eine Funktion

$$\psi \;=\; \psi(\xi,\tau) \tag{7}$$

Die Lösung der dimensionsbehafteten Gleichung (5) ist dann gegeben durch

$$\psi \;=\; \psi\big(\tfrac{x}{\ell}\,,\,\omega t\big) \tag{8}$$

Hat ψ die Norm 1 im ξ-Raum, dann müssen wir, wenn wir eine normierte Lösung im x-Raum haben wollen, noch durch $\sqrt{\ell}$ teilen, also

$$\tilde{\psi}(x,t) \;:=\; \tfrac{1}{\sqrt{\ell}}\,\psi\big(\tfrac{x}{\ell}\,,\,\omega t\big) \tag{9}$$

ist die normierte Lösung im x-Raum. Nach der Gleichung (4) von oben haben wir also

$$\psi(\xi,\tau) \;=\; e^{-\frac{c^2}{2}}\,\sum_{n=0}^{\infty}\tfrac{c^n}{\sqrt{n!}}\,\big(e^{-i\tau\hat{H}_\beta}h_n\big)(\xi) \tag{10}$$

mit

$$\psi(\xi,0) \;=\; e^{-\frac{c^2}{2}}\,\sum_{n=0}^{\infty}\tfrac{c^n}{\sqrt{n!}}\,h_n(\xi) \;=\; h_0(\xi-\xi_0) \tag{11}$$

und $c := \xi_0/\sqrt{2}$.

Implementierung der Bohr-Sommerfeld Quantisierung

Wir machen jetzt die folgende Näherung[2]:

$$e^{-i\tau\hat{H}_\beta}\, h_n \;\approx\; e^{-iE_n\tau}\, h_n \tag{12}$$

mit den E_n's aus dem Theorem 3.2.4 von `week11.pdf`, das war die folgende Formel:

$$E_n \;=\; n \,+\, \tfrac{1}{2} \,+\, \tfrac{3\beta}{8}\left(n^2 \,+\, n \,+\, \tfrac{1}{4}\right) \tag{13}$$

Damit bekommen wir dann also

$$\psi_\tau(\xi) \;\equiv\; \psi(\xi,\tau) \;\approx\; e^{-\frac{c^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{c^n}{\sqrt{n!}}\, e^{-iE_n\tau} h_n(\xi) \tag{14}$$

Jetzt können wir die Grösse $\langle x_t\rangle$ berechnen. Zunächst mal ist

$$\begin{aligned}
\langle x_t\rangle \;&=\; \langle\tilde{\psi}_t, x\,\tilde{\psi}_t\rangle \;=\; \textstyle\int_{\mathbb{R}} x\,|\tilde{\psi}_t(x)|^2\,dx \;=\; \int_{\mathbb{R}} x\,\left|\tfrac{1}{\sqrt{\ell}}\,\psi\big(\tfrac{x}{\ell},\omega t\big)\right|^2 dx \\
&=\; \ell\,\textstyle\int_{\mathbb{R}} \tfrac{x}{\ell}\,\left|\psi\big(\tfrac{x}{\ell},\omega t\big)\right|^2 d\big(\tfrac{x}{\ell}\big) \;=\; \ell\,\int_{\mathbb{R}} \xi\,|\psi_{\omega t}(\xi)|^2\,d\xi \;=:\; \ell\,\times\,\langle\xi_{\omega t}\rangle
\end{aligned}$$

und wir erhalten mit der Näherung (14)

$$\begin{aligned}
\langle\xi_\tau\rangle \;&=\; e^{-c^2} \sum_{m,n=0}^{\infty} \tfrac{c^m}{\sqrt{m!}}\tfrac{c^n}{\sqrt{n!}}\, e^{-iE_m\tau} e^{+iE_n\tau}\,\langle h_m, \xi\, h_n\rangle \\
&=\; \tfrac{1}{\sqrt{2}}\, e^{-c^2} \sum_{m,n=0}^{\infty} \tfrac{c^m}{\sqrt{m!}}\tfrac{c^n}{\sqrt{n!}}\, e^{-i(E_m-E_n)\tau}\,\big\langle h_m, (a+a^+)h_n\big\rangle
\end{aligned} \tag{15}$$

Nun ist

$$\begin{aligned}
\big\langle h_m, (a+a^+)h_n\big\rangle \;&=\; \langle a^+h_m, h_n\rangle \,+\, \langle h_m, a^+h_n\rangle \\
&=\; \sqrt{m+1}\,\langle h_{m+1}, h_n\rangle \,+\, \sqrt{n+1}\,\langle h_m, h_{n+1}\rangle \\
&=\; \sqrt{m+1}\,\delta_{m+1,n} \,+\, \sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}
\end{aligned}$$

Wenn wir das in (15) einsetzen, bekommen wir

$$\begin{aligned}
\langle\xi_\tau\rangle \;&=\; \tfrac{1}{\sqrt{2}}\, e^{-c^2} \sum_{m,n=0}^{\infty} \tfrac{c^m}{\sqrt{m!}}\tfrac{c^n}{\sqrt{n!}}\, e^{-i(E_m-E_n)\tau}\,\left\{\,\sqrt{m+1}\,\delta_{m+1,n} \,+\, \sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}\,\right\} \\
&=\; \tfrac{1}{\sqrt{2}}\, e^{-c^2}\,\Bigg\{ \sum_{m=0}^{\infty} \tfrac{c^m}{\sqrt{m!}}\tfrac{c^{m+1}}{\sqrt{(m+1)!}}\, e^{-i(E_m-E_{m+1})\tau}\sqrt{m+1} \;+ \\
&\qquad\qquad +\; \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{c^{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}}\tfrac{c^n}{\sqrt{n!}}\, e^{-i(E_{n+1}-E_n)\tau}\sqrt{n+1}\,\Bigg\}
\end{aligned} \tag{16}$$

[2]das ist also nicht nur eine Näherung für die Eigenwerte, sondern wir nehmen auch an, dass der Einfluss der Anharmonizität für kleine β auf die Eigenfunktionen vernachlässigbar ist

In der ersten Summe von (16) tun wir den Summationsindex von m nach n umbenennen und schreiben

$$\begin{aligned}
\langle \xi_\tau \rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\, e^{-c^2} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{c^{2n+1}}{n!}\, e^{+i(E_{n+1}-E_n)\tau} \;+\; \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{c^{2n+1}}{n!}\, e^{-i(E_{n+1}-E_n)\tau} \right\} \\
&= \tfrac{c}{\sqrt{2}}\, e^{-c^2}\; 2\,\mathrm{Re}\left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{c^{2n}}{n!}\, e^{+i(E_{n+1}-E_n)\tau} \right\} \\
&= \xi_0 \;\times\; \mathrm{Re}\left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{c^{2n}}{n!}\, e^{-c^2}\, e^{+i(E_{n+1}-E_n)\tau} \right\} \qquad (17)
\end{aligned}$$

Jetzt benutzen wir die Gleichung (13),

$$E_n \;=\; n \;+\; \tfrac{1}{2} \;+\; \tfrac{3\beta}{8}\left(n^2 \;+\; n \;+\; \tfrac{1}{4} \right)$$

und bekommen

$$\begin{aligned}
E_{n+1} - E_n &= 1 \;+\; \tfrac{3\beta}{8} \;+\; \tfrac{3\beta}{8}(2n+1) \\
&= 1 \;+\; \tfrac{3\beta}{4} \;+\; \tfrac{3\beta}{4} n \\
&=: \tilde{\omega} \;+\; \alpha n
\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
\tilde{\omega} &:= 1 \;+\; \tfrac{3\beta}{4} \\
\alpha &:= \tfrac{3}{4}\beta \;.
\end{aligned}$$

Damit erhalten wir für die Summe in dem Realteil in (17)

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{c^{2n}}{n!}\, e^{-c^2}\, e^{+i(E_{n+1}-E_n)\tau} &= e^{i\tilde{\omega}\tau} \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{c^{2n}}{n!}\, e^{-c^2}\, e^{i\alpha n\tau} \\
&= e^{i\tilde{\omega}\tau} \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{(c^2 e^{i\alpha\tau})^n}{n!}\, e^{-c^2} \\
&= e^{i\tilde{\omega}\tau}\, e^{c^2 e^{i\alpha\tau}}\, e^{-c^2} \\
&= e^{i\tilde{\omega}\tau}\, e^{c^2\cos\alpha\tau + ic^2\sin\alpha\tau}\, e^{-c^2} \\
&= e^{-c^2[1-\cos\alpha\tau]} \;\times\; e^{i[\tilde{\omega}\tau + c^2\sin\alpha\tau]}
\end{aligned}$$

und bekommen schliesslich das End-Resultat

$$\begin{aligned}
\langle \xi_\tau \rangle &= \xi_0 \;\times\; \mathrm{Re}\left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{c^{2n}}{n!}\, e^{-c^2}\, e^{+i(E_{n+1}-E_n)\tau} \right\} \\
&= \xi_0 \;\times\; e^{-\frac{\xi_0^2}{2}[1-\cos\alpha\tau]} \;\times\; \cos\left[(1+\tfrac{3\beta}{4})\tau \;+\; \tfrac{\xi_0^2}{2}\sin\alpha\tau \right] \qquad (18)
\end{aligned}$$

Die Collapse and Revivals werden offensichtlich generiert von dem Amplitudenfaktor

$$\exp\Big\{ -\tfrac{\xi_0^2}{2}[1 \,-\, \cos\alpha\tau] \Big\} \;\; = \;\; \exp\Big\{ -\tfrac{\xi_0^2}{2}\big[1 \,-\, \cos(\tfrac{3}{4}\beta\tau)\big] \Big\} \tag{19}$$

in (18). Für

$$\tau \;\; \in \;\; \big\{ 0\,,\, \tfrac{8\pi}{3\beta}\,,\, 2\times\tfrac{8\pi}{3\beta}\,,\, 3\times\tfrac{8\pi}{3\beta}\,,\, \cdots \big\}$$

ist der Cosinus gleich 1, der Exponent ist gleich 0 und damit der Amplitudenfaktor gleich 1, man hat dann im wesentlichen die harmonische Schwingung $\cos\tau = \cos\omega t$. Die Revival-Zeit ist also gegeben durch

$$\tau_R \;\; = \;\; \tfrac{8\pi}{3\beta} \tag{20}$$

Die Collapse-Zeit definiert man üblicherweise als die Zeit, die es braucht, um eine Amplitudenreduktion um den Faktor $1/e$ zu erhalten, das wäre hier dann also

$$-\tfrac{\xi_0^2}{2}\big[1 \,-\, \cos(\tfrac{3}{4}\beta\tau)\big] \;\; \approx \;\; -\tfrac{\xi_0^2}{2} \;\times\; \tfrac{1}{2}(\tfrac{3}{4}\beta\tau)^2 \;\; \stackrel{!}{=} \;\; -1$$

oder

$$\tau_C \;\; = \;\; \tfrac{8}{3\beta\xi_0} \;\; = \;\; \tfrac{\tau_R}{\pi\,\xi_0} \tag{21}$$

Sowohl Collapse- wie auch Revival-Zeit sind also proportional zu $1/\beta$.

Numerischer Test

Wir wollen das Resultat aus (18) mit der exakten Dynamik vergleichen. Wir benutzen wieder die Basis

$$B_N \;\; := \;\; \big\{\, h_n \,\big\}_{n=0}^{N}$$

und erinnern uns an die Matrix-Darstellung von $\hat{H}_\beta$ bezüglich B_N. Diese hatten wir in dem `week11.pdf` hergeleitet:

$$\langle h_n, \hat{H}_\beta h_m \rangle \;\; = \;\; \big(n + \tfrac{1}{2}\big)\,\delta_{n,m} \;+\; \tfrac{\beta}{16}\,\big\langle h_n, (a^+ + a)^4 h_m \big\rangle \tag{22}$$

mit

$$\begin{aligned}
\big\langle h_n, (a^+ + a)^4 h_m \big\rangle \;\; &= \;\; \delta_{n,m}\,\big[6n(n+1)+3\big] \\
&+ \delta_{n,m+2}\,(4m+6)\sqrt{n(n-1)} \;+\; \delta_{n+2,m}\,(4n+6)\sqrt{m(m-1)} \\
&+ \delta_{n,m+4}\,\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)} \;+\; \delta_{n+4,m}\,\sqrt{m(m-1)(m-2)(m-3)}
\end{aligned}$$

Bezeichnen wir die $(N+1)\times(N+1)$ Matrix mit Matrix-Elementen gegeben durch (22) etwa mit H_N, dann können wir numerisch die exakten Eigenwerte und Eigenvektoren von H_N berechnen,

$$H_N\, v_j \;\; = \;\; \varepsilon_j\, v_j$$

mit $v_j \in \mathbb{C}^{N+1}$ für $j = 0, ..., N$ und, sagen wir, $\varepsilon_0 \leq \varepsilon_1 \leq \cdots \leq \varepsilon_N$. Die Standardbasis in $\mathbb{C}^{N+1}$ entspricht dann also den $h_0, h_1, \cdots, h_N$ und der Anfangszustand ψ_0 ist gegeben durch den Vektor

$$\psi_0 \;=\; e^{-\frac{c^2}{2}} \left(\tfrac{c^n}{\sqrt{n!}} \right)_{n=0}^{N} \;\in\; \mathbb{C}^{N+1}$$

mit $c = \xi_0/\sqrt{2}$. Um die exakte Dynamik von ψ_0 zu berechnen, müssen wir nach den exakten Eigenfunktionen von H_N entwickeln. Das sind die v_j, nicht die h_j. Wir schreiben also

$$\psi_0 \;=\; \sum_{j=0}^{N} \langle \psi_0, v_j \rangle \, v_j$$

und bekommen dann die exakte Dynamik

$$\begin{aligned} \psi_\tau &= \sum_{j=0}^{N} \langle \psi_0, v_j \rangle \, e^{-i\varepsilon_j \tau} \, v_j \\ &= \sum_{j=0}^{N} \langle \psi_0, v_j \rangle \, e^{-i\varepsilon_j \tau} \sum_{n=0}^{N} \langle v_j, h_n \rangle \, h_n \\ &=: \sum_{n=0}^{N} c_n(\tau) \, h_n \end{aligned}$$

mit den Koeffizienten

$$c_n(\tau) \;:=\; \sum_{j=0}^{N} \langle \psi_0, v_j \rangle \, e^{-i\varepsilon_j \tau} \, \langle v_j, h_n \rangle \tag{23}$$

Das exakte $\langle \xi_\tau \rangle$ ist dann gegeben durch

$$\begin{aligned} \langle \xi_\tau \rangle &= \langle \psi_\tau, \xi \psi_\tau \rangle \;=\; \tfrac{1}{\sqrt{2}} \langle \psi_\tau, (a^+ + a)\psi_\tau \rangle \;=\; \tfrac{2}{\sqrt{2}} \operatorname{Re}\big\{ \langle \psi_\tau, a^+ \psi_\tau \rangle \big\} \\ &= \sqrt{2} \operatorname{Re}\Big\{ \sum_{n=0}^{N} \sqrt{n+1} \; c_n(t) \, \overline{c_{n+1}(t)} \Big\} \end{aligned} \tag{24}$$

Wir wählen $N = 500$ und betrachten die zwei Anfangsbedingungen

$$\begin{aligned} \xi_0 &= 1 \\ \xi_0 &= 4 \end{aligned}$$

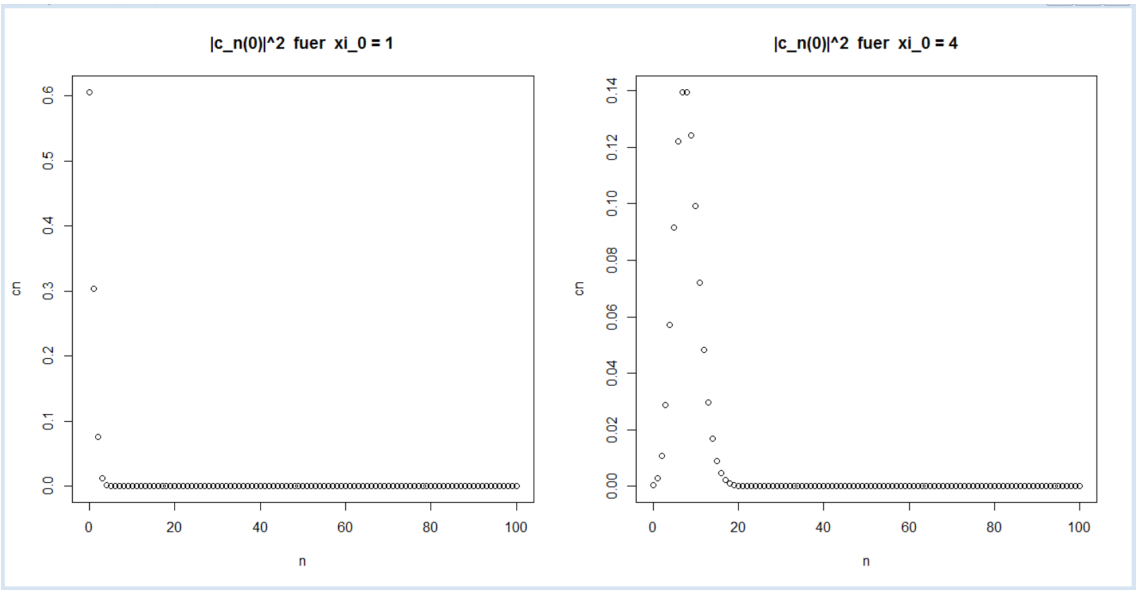
Wegen

$$e^{-\frac{\xi_0^2}{2}} \;=\; \begin{cases} e^{-\frac{1}{2}} & \approx \; 0.6065 \quad \text{für } \xi_0 = 1 \\ e^{-\frac{16}{2}} & \approx \; 0.0003 \quad \text{für } \xi_0 = 4 \end{cases}$$

sollten wir für $\xi_0 = 4$ ausgeprägte Collapse- und Revival-Phasen sehen, genau dieser Fall ist auf den Bildern auf der VL-homepage dargestellt, wohingegen man für $\xi_0 = 1$ nur leichtere Modulationen der Amplitude sehen sollte. Schauen wir uns zunächst die numerischen Werte für die Entwicklungskoeffizienten

$$|c_n(0)|^2 \;=\; e^{-c^2} \, \tfrac{c^{2n}}{n!} \;=\; e^{-\frac{\xi_0^2}{2}} \, \tfrac{(\xi_0^2/2)^n}{n!}$$

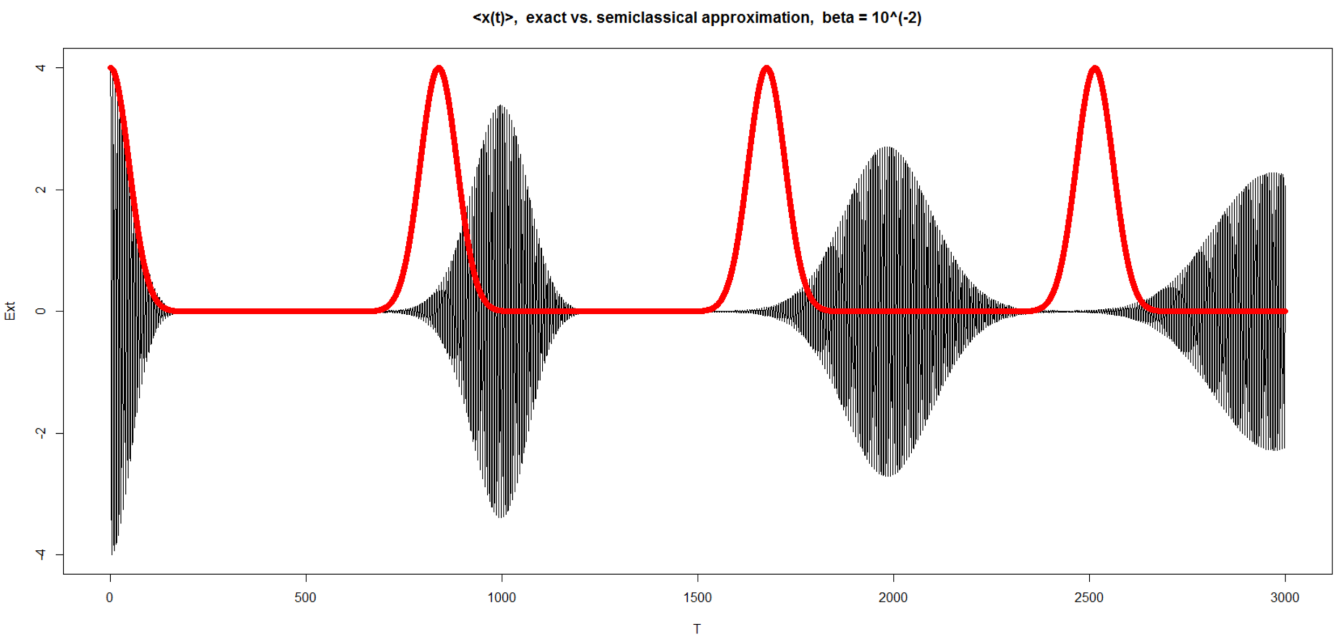
für das ψ_0 an:



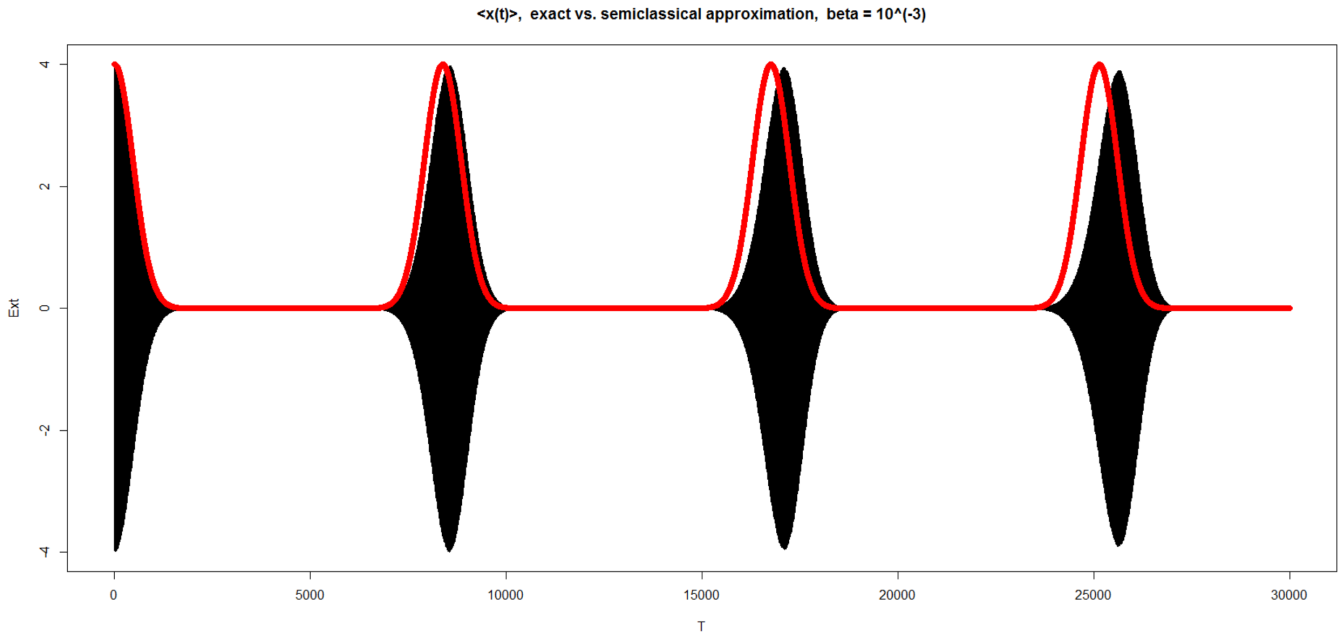
Für die numerische Berechnung der exakten Dynamik sollte es also keine Einschränkung sein, wenn wir etwa

$$\psi_0 \quad = \quad e^{-\frac{c^2}{2}} \left(\frac{c^n}{\sqrt{n!}} \right)_{n=0}^{150} \quad \in \quad \mathbb{C}^{151}$$

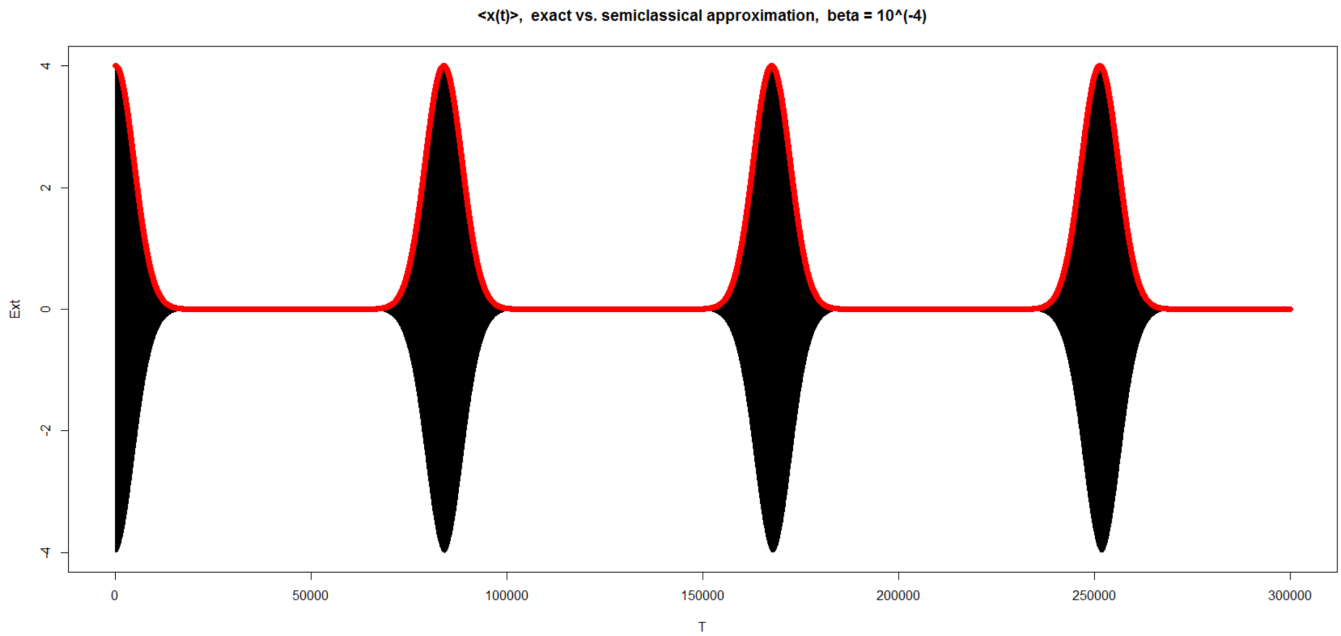
setzen. D.h., wir benutzen eine 500×500 Matrix zur Berechnung der exakten Eigenwerte und Eigenvektoren, benutzen davon aber jeweils nur die ersten 150. Wir bekommen dann die folgenden Resultate, die exakte Dynamik in schwarz und die semiklassische Approximation in rot. Zunächst die Bilder von der Vorlesungshomepage, das $\langle x_t \rangle$ in der Überschrift meint nicht wirklich das $\langle x_t \rangle$, sondern das ist das $\langle \xi_t \rangle$ mit einem $\xi_0 = 4$:



$\langle \xi_t \rangle$ für $\xi_0 = 4$ und $\beta = 10^{-2}$

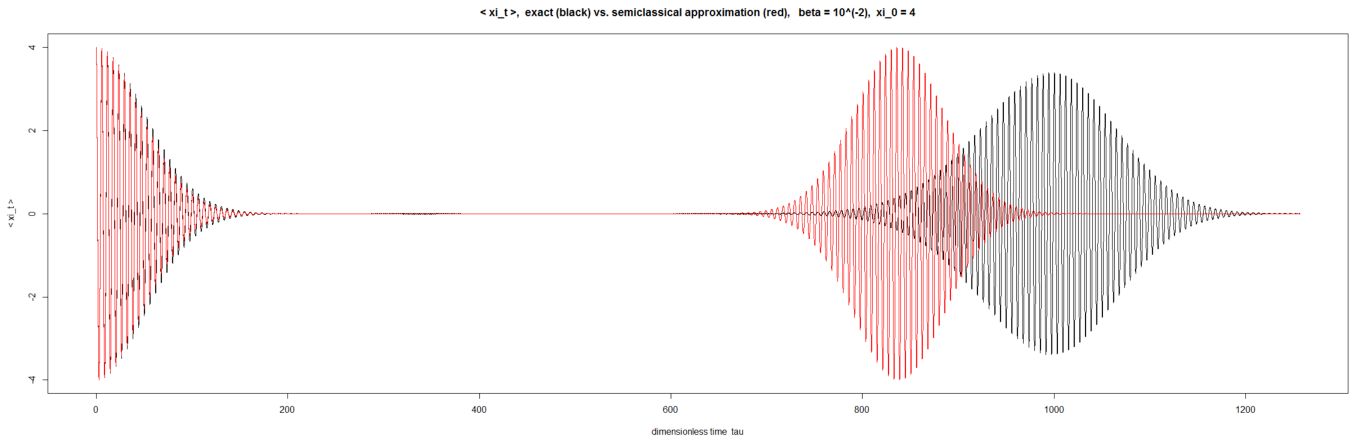


$\langle \xi_t \rangle$ für $\xi_0 = 4$ und $\beta = 10^{-3}$

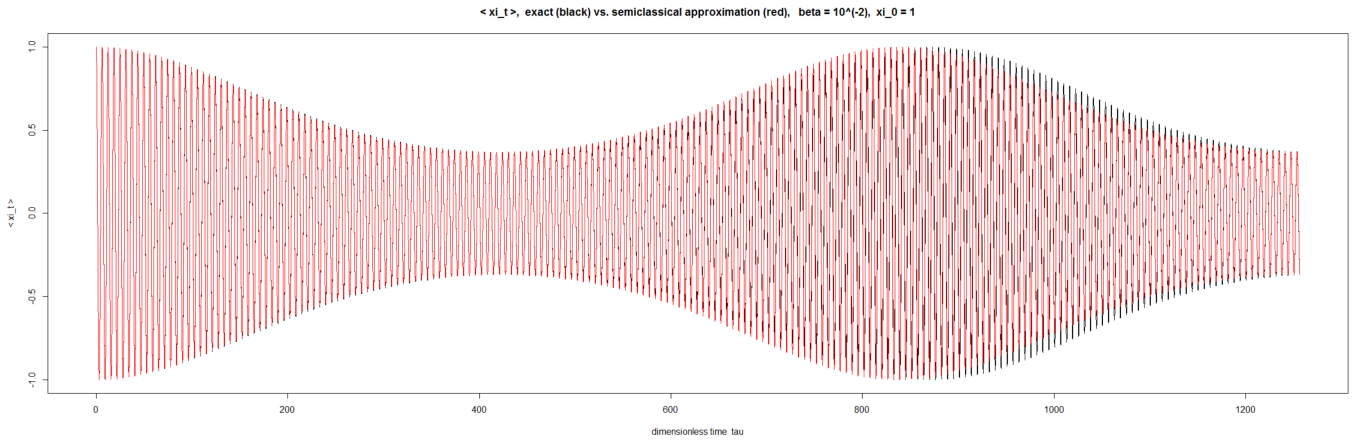


$\langle \xi_t \rangle$ für $\xi_0 = 4$ und $\beta = 10^{-4}$

Dabei zeigt die rote Kurve nur den Amplitudenfaktor (19). Wenn man die volle Approximation (18) nimmt, also mit dem Cosinus, bekommt man etwa die folgenden Bilder, wobei wir jetzt den Zeithorizont etwas kleiner gewählt haben, damit man zumindest noch für den Fall $\beta = 10^{-2}$ die eigentlichen Oszillationen sehen kann:

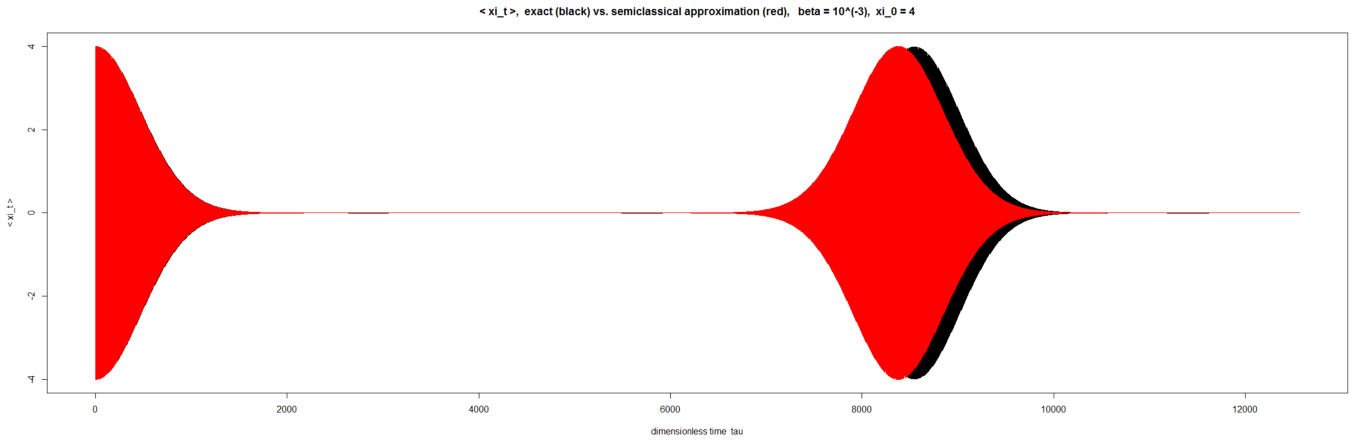


$\langle \xi_t \rangle$ für $\xi_0 = 4$ und $\beta = 10^{-2}$

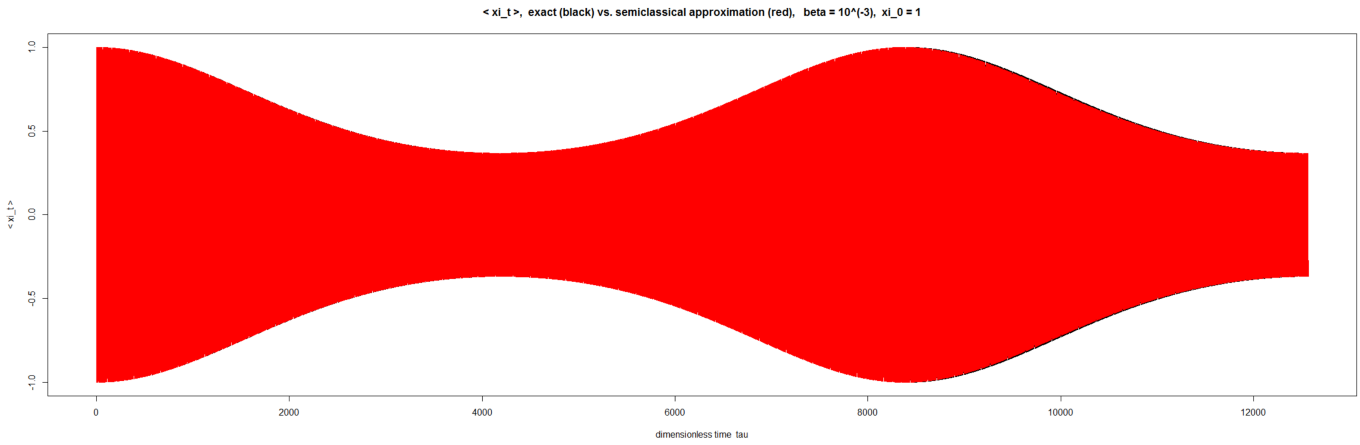


$\langle \xi_t \rangle$ für $\xi_0 = 1$ und $\beta = 10^{-2}$

Und jetzt dieselben Bilder für $\beta = 10^{-3}$, der Zeithorizont entsprechend verzehnfacht:



$\langle \xi_t \rangle$ für $\xi_0 = 4$ und $\beta = 10^{-3}$



$\langle \xi_t \rangle$ für $\xi_0 = 1$ und $\beta = 10^{-3}$