VL11 Kapitel 4.2: Quantenmechanischer anharmonischer Oszillator
4.2.1 Lösung des Eigenwertproblems mit Bohr-Sommerfeld Quantisierung

Letzte Woche hatten wir im `week10.pdf` die Zeitevolution des quantenmechanischen harmonischen Oszillators bestimmt und wir hatten den Aufenthaltsort des Teilchens zur Zeit t, die Grösse

$$\langle x_t \rangle \;:=\; \int_{\mathbb{R}} x\,|\psi_t(x)|^2\,dx \tag{1}$$

berechnet mit dem Resultat

$$\langle x_t \rangle \;=\; x_0\,\cos(\omega t)\;, \tag{2}$$

der quantenmechanische Erwartungswert stimmte also exakt überein mit dem klassischen Resultat. Jetzt wollen wir noch einmal genau dasselbe machen, allerdings für einen leicht anharmonischen Oszillator mit klassischer Hamilton-Funktion

$$H(x,p) \;=\; \tfrac{p^2}{2m} \,+\, \tfrac{D}{2}\,x^2 \,+\, \tfrac{\lambda}{4}\,x^4 \tag{3}$$

Für $\lambda = 0$ ist das ein harmonischer Oszillator und wir wollen hier jetzt den Fall von kleinen positiven λ's betrachten. Im klassischen Fall unterscheidet sich die Bewegung dann kaum von der $\lambda = 0$ Bewegung. Das ändert sich allerdings im quantenmechanischen Fall, das $\langle x_t \rangle$ ist nicht nur eine leichte Variation von dem $x_0\,\cos(\omega t)$, sondern man bekommt das Phänomen von Collapse and Revivals, das ist also ein rein quantenmechanisches Phänomen, und das wollen wir uns hier jetzt noch genauer anschauen.

Der Hamilton-Operator ist gegeben durch

$$\begin{aligned}
\hat H_\lambda &= -\tfrac{\hbar^2}{2m}\,\tfrac{d^2}{dx^2} \,+\, \tfrac{D}{2}\,x^2 \,+\, \tfrac{\lambda}{4}\,x^4 \\
&= -\tfrac{\hbar^2}{2m}\,\tfrac{d^2}{dx^2} \,+\, \tfrac{m\omega^2}{2}\,x^2 \,+\, \tfrac{\lambda}{4}\,x^4 \\
&= \tfrac{\hbar\omega}{2}\Big\{-\tfrac{\hbar}{m\omega}\,\tfrac{d^2}{dx^2} \,+\, \tfrac{m\omega}{\hbar}\,x^2 \,+\, \tfrac{\lambda}{2\hbar\omega}\,x^4\Big\} \\
&= \tfrac{\hbar\omega}{2}\Big\{-\ell^2\,\tfrac{d^2}{dx^2} \,+\, \tfrac{1}{\ell^2}\,x^2 \,+\, \tfrac{\lambda\ell^4}{2\hbar\omega}\,\tfrac{x^4}{\ell^4}\Big\} \\
&= \tfrac{\hbar\omega}{2}\Big\{-\tfrac{d^2}{[d(x/\ell)]^2} \,+\, (x/\ell)^2 \,+\, \tfrac{2\lambda\ell^4}{\hbar\omega}\,\tfrac{x^4}{4\ell^4}\Big\} \\
&= \hbar\omega\,\Big[\tfrac12\Big\{-\tfrac{d^2}{d\xi^2} \,+\, \xi^2\,\Big\} \,+\, \tfrac{\beta}{4}\,\xi^4\Big]
\end{aligned} \tag{4}$$

mit der Länge

$$\ell \;:=\; \sqrt{\tfrac{\hbar}{m\omega}}$$

und der dimensionslosen Grösse

$$\xi \;:=\; \tfrac{x}{\ell}$$

und dem anharmonischen Kopplungsparameter

$$\beta \;:=\; \tfrac{\lambda \ell^4}{\hbar\omega} \;=\; \tfrac{\lambda\hbar}{m^2\omega^3}$$

Der Ausdruck in den eckigen Klammern in (4) hängt nur von der ξ-Variable ab und wir geben ihn einen eigenen Namen, also schreiben wir etwa

$$\hat{H}_\lambda \;=\; \hbar\omega\, \hat{H}_\beta$$

mit

$$\hat{H}_\beta \;=\; \tfrac{1}{2}\Big\{ -\tfrac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \Big\} + \tfrac{\beta}{4}\,\xi^4 \tag{5}$$

Für $\beta = 0$ ist das der harmonische Oszillator und das Eigenwertproblem hatten wir in dem `week9.pdf` gelöst,

$$\hat{H}_{\beta=0}\, h_n \;=\; \big(n + \tfrac{1}{2}\big)\, h_n$$

mit den Hermite-Funktionen

$$\begin{aligned} h_n(\xi) \;&=\; \Big\{ \tfrac{1}{\sqrt{n!}}\,(a^+)^n\, h_0 \Big\}(\xi) \\ &=\; \tfrac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}}\, H_n(\xi)\, e^{-\frac{\xi^2}{2}} \;\;. \end{aligned}$$

Bohr-Sommerfeld Quantisierung

Für $\beta \neq 0$ ist keine analytische Lösung des Eigenwertproblems bekannt, man ist also auf Näherungsmethoden angewiesen. Eine davon ist die Bohr-Sommerfeld Quantisierung, da macht man folgendes: Dem Hamilton-Operator aus (5) ordnet man die klassische Hamilton-Funktion[1]

$$H(x,p) \;:=\; \tfrac{p^2}{2} + \tfrac{x^2}{2} + \tfrac{\beta}{4}\, x^4$$

zu. Jede Lösungskurve (x_t, p_t) des klassischen Systems genügt der Energieerhaltung

$$H(x_t,p_t) \;=\; \tfrac{p_t^2}{2} + \tfrac{x_t^2}{2} + \tfrac{\beta}{4}\, x_t^4 \;=\; E$$

Die Impulse sind also gegeben durch

$$p_t \;=\; \pm\sqrt{2\big(E - \tfrac{x_t^2}{2} - \tfrac{\beta}{4}\, x_t^4\big)}$$

Wenn wir eine Anfangsbedingung $x_{t=0} = x_0$ und $p_{t=0} = 0$ betrachten, findet die Bewegung für alle Zeiten zwischen den Umkehrpunkten $-x_0$ und x_0 statt. Man startet bei x_0 zur Zeit $t = 0$, ist nach einer halben Periodendauer, also bei Zeit $t = T/2$, bei $-x_0$, und dann nach einer vollen Periodendauer bei Zeit $t = T$ wieder bei x_0. Man betrachtet dann das Wirkungs-Integral (Wirkung ist Energie mal Zeit)

[1] vielleicht wäre die Notation $H(\xi, p_\xi) = \frac{p_\xi^2}{2} + \frac{\xi^2}{2} + \frac{\beta}{4}\,\xi^4$ angemessener

$$
\begin{aligned}
I \;&:=\; \tfrac{1}{\pi}\int_0^{T/2} p_t\,\dot{x}_t\,dt \qquad (6)\\
&=\; \tfrac{1}{\pi}\int_0^{T/2}\Big(-\sqrt{2\big(E\,-\,\tfrac{x_t^2}{2}\,-\,\tfrac{\beta}{4}\,x_t^4\big)}\,\Big)\,\dot{x}_t\;dt\\
&=\; \tfrac{1}{\pi}\int_{+x_0}^{-x_0}\Big(-\sqrt{2\big(E\,-\,\tfrac{x^2}{2}\,-\,\tfrac{\beta}{4}\,x^4\big)}\,\Big)\;dx\\
&=\; \tfrac{1}{\pi}\int_{-x_0}^{x_0}\sqrt{2\big(E\,-\,\tfrac{x^2}{2}\,-\,\tfrac{\beta}{4}\,x^4\big)}\;dx\\
&=\; \frac{2\int_{-x_0}^{x_0}\sqrt{2\big(E\,-\,\tfrac{x^2}{2}\,-\,\tfrac{\beta}{4}\,x^4\big)}\;dx}{2\pi}\\
&=\; \frac{\text{von der Lösungskurve eingeschlossene Phasenraumfläche}}{2\pi}
\end{aligned}
$$

wobei der Begriff Phasenraum einfach den (x,p)-Raum meint. Bohr-Sommerfeld Quantisierung besteht nun darin zu sagen, dass die Energieeigenwerte E_n des quantenmechanischen Systems die Gleichung

$$
I(E_n) \;\stackrel{!}{=}\; n\,+\,\tfrac{1}{2} \qquad (7)
$$

erfüllen sollen. Also im wesentlichen: Das Wirkungsintegral I soll ganzzahlig sein und das $\frac{1}{2}$ auf der rechten Seite von (7) hat man deshalb noch mit dazu genommen, damit das dann für den harmonischen Oszillator auch wirklich exakt herauskommt, schauen wir uns das eben an: Für $\beta = 0$ bekommen wir mit der vierten Zeile von (6)

$$
\begin{aligned}
I(E) \;&=\; \tfrac{1}{\pi}\int_{-x_0}^{x_0}\sqrt{2\big(E\,-\,\tfrac{x^2}{2}\big)}\;dx\\
&=\; \tfrac{1}{\pi}\int_{-x_0}^{x_0}\sqrt{2\big(\tfrac{x_0^2}{2}\,-\,\tfrac{x^2}{2}\big)}\;dx\\
&=\; \tfrac{x_0}{\pi}\int_{-x_0}^{x_0}\sqrt{1\,-\,\big(\tfrac{x}{x_0}\big)^2}\;dx\\
&=\; \tfrac{x_0^2}{\pi}\int_{-x_0}^{x_0}\sqrt{1\,-\,\big(\tfrac{x}{x_0}\big)^2}\;d\big(\tfrac{x}{x_0}\big)\\
&=\; \tfrac{x_0^2}{\pi}\int_{-1}^{1}\sqrt{1\,-\,v^2}\;dv\\
&=\; \tfrac{x_0^2}{\pi}\,\tfrac{\pi}{2} \;=\; \tfrac{x_0^2}{2} \;=\; E
\end{aligned}
$$

Also die Forderung (7) liefert dann die exakten Eigenwerte des harmonischen Oszillators. Schauen wir uns das jetzt für den anharmonischen Oszillator an. Wir wollen den Fall kleiner β's, $\beta \ll 1$ betrachten und Terme erster Ordnung in β mit berücksichtigen. Wir haben wieder mit der vierten Zeile von (6)

$$
\begin{aligned}
I(E) &= \tfrac{1}{\pi}\int_{-x_0}^{x_0}\sqrt{2\big(E \,-\, \tfrac{x^2}{2} \,-\, \tfrac{\beta}{4}\,x^4\big)}\;dx \\
&= \tfrac{1}{\pi}\int_{-x_0}^{x_0}\sqrt{2\big(\tfrac{x_0^2}{2} \,+\, \tfrac{\beta}{4}\,x_0^4 \,-\, \tfrac{x^2}{2} \,-\, \tfrac{\beta}{4}\,x^4\big)}\;dx \\
&= \tfrac{1}{\pi}\int_{-x_0}^{x_0}\sqrt{x_0^2 - x^2 \,+\, \tfrac{\beta}{2}\,(x_0^4 - x^4)}\;dx \\
&= \tfrac{x_0}{\pi}\int_{-x_0}^{x_0}\sqrt{1 - \big(\tfrac{x}{x_0}\big)^2 \,+\, \tfrac{\beta x_0^2}{2}\,\big[1 - \big(\tfrac{x}{x_0}\big)^4\big]}\;dx \\
&= \tfrac{x_0^2}{\pi}\int_{-1}^{1}\sqrt{1 - v^2 \,+\, \tfrac{\beta x_0^2}{2}(1 - v^4)}\;dv
\end{aligned}
$$

Jetzt benutzen wir die Näherung

$$
\sqrt{x+h} \;=\; \sqrt{x} \,+\, \tfrac{1}{2\sqrt{x}}\,h \,+\, O(h^2) \tag{8}
$$

und approximieren

$$
\begin{aligned}
I(E) &= \tfrac{x_0^2}{\pi}\int_{-1}^{1}\sqrt{1 - v^2 \,+\, \tfrac{\beta x_0^2}{2}(1 - v^4)}\;dv \\
&\approx \tfrac{x_0^2}{\pi}\int_{-1}^{1}\Big\{\sqrt{1-v^2} \,+\, \tfrac{1}{2\sqrt{1-v^2}}\,\tfrac{\beta x_0^2}{2}(1-v^4)\Big\}\;dv \\
&= \tfrac{x_0^2}{\pi}\Big\{\tfrac{\pi}{2} \,+\, \tfrac{\beta x_0^2}{4}\int_{-1}^{1}\tfrac{1-v^4}{\sqrt{1-v^2}}\;dv\Big\}
\end{aligned}
$$

Wir haben

$$
\begin{aligned}
\int_{-1}^{1}\tfrac{1-v^4}{\sqrt{1-v^2}}\;dv &= \int_{-1}^{1}\tfrac{(1-v^2)(1+v^2)}{\sqrt{1-v^2}}\;dv \\
&= \int_{-1}^{1}\sqrt{1-v^2}\,(1+v^2)\;dv \\
&= \int_{-1}^{1}\sqrt{1-v^2}\;dv \,+\, \int_{-1}^{1}v^2\,\sqrt{1-v^2}\;dv \\
&= \tfrac{\pi}{2} \,+\, \int_{-\pi/2}^{\pi/2}\sin^2\phi\cos^2\phi\;d\phi \\
&= \tfrac{\pi}{2} \,+\, \tfrac{1}{4}\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\sin^2(2\phi)\;d\phi \\
&= \tfrac{\pi}{2} \,+\, \tfrac{1}{8}\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\big[1 \,-\, \cos(4\phi)\big]\;d\phi \\
&= \tfrac{\pi}{2} \,+\, \tfrac{\pi}{8} \,-\, \tfrac{1}{32}\int_{-2\pi}^{2\pi}\cos(\varphi)\;d\varphi \\
&= \tfrac{5\pi}{8}
\end{aligned}
$$

und damit

$$
\begin{aligned}
I(E) &\approx \tfrac{x_0^2}{2} \,+\, \tfrac{\beta x_0^4}{4\pi}\times\tfrac{5\pi}{8} \\
&= \tfrac{x_0^2}{2} \,+\, \tfrac{\beta x_0^4}{4} \,-\, \tfrac{3}{8}\,\tfrac{\beta x_0^4}{4} \\
&= E \,-\, \tfrac{3}{8}\,\tfrac{\beta x_0^4}{4}
\end{aligned} \tag{9}
$$

Wir müssen das x_0^4 durch das E ausdrücken. Wir haben

$$
\begin{aligned}
& & \tfrac{x_0^2}{2} \,+\, \tfrac{\beta x_0^4}{4} &= E \\
&\Leftrightarrow & x_0^4 \,+\, \tfrac{2}{\beta}\,x_0^2 \,-\, \tfrac{4}{\beta}\,E &= 0
\end{aligned}
$$

und damit

$$x_0^2 \;=\; -\,\tfrac{1}{\beta} \,+\, \sqrt{\tfrac{1}{\beta^2} \,+\, \tfrac{4E}{\beta}} \;=\; \frac{\sqrt{1+4\beta E}\,-1}{\beta} \;=\; \frac{4\beta E}{\beta(\sqrt{1+4\beta E}\,+1)} \;=\; \frac{4E}{\sqrt{1+4\beta E}\,+1}$$

Wir benutzen erneut die Näherung (8) und erhalten

$$\begin{aligned} x_0^2 &= \frac{4E}{\sqrt{1+4\beta E}\,+1} \\ &\approx \frac{4E}{1+\frac{1}{2}4\beta E+1} \\ &= \frac{2E}{1+\beta E} \\ &= 2E\big\{1 \,-\, \beta E \,+\, O(\beta^2)\big\} \end{aligned}$$

Damit bekommen wir

$$\begin{aligned} \tfrac{x_0^4}{4} \;=\; \big(\tfrac{x_0^2}{2}\big)^2 &= E^2\big\{1 \,-\, \beta E \,+\, O(\beta^2)\big\}^2 \\ &= E^2\big\{1 \,-\, 2\beta E \,+\, O(\beta^2)\big\} \end{aligned}$$

Das setzen wir ein in Gleichung (9) und erhalten

$$\begin{aligned} I(E) &= E \,-\, \tfrac{3}{8}\,\tfrac{\beta x_0^4}{4} \\ &= E \,-\, \tfrac{3}{8}\,\beta E^2 \,+\, O(\beta^2) \end{aligned} \tag{10}$$

Jetzt wenden wir die Bohr-Sommerfeld Quantisierung an und sagen:

$$I(E_n) \;\overset{!}{=}\; n \,+\, \tfrac{1}{2} \tag{11}$$

Damit bekommen wir die folgende quadratische Gleichung für die E_n's:

$$E_n \,-\, \tfrac{3}{8}\,\beta E_n^2 \;=\; n \,+\, \tfrac{1}{2}$$

Wir lösen das auf nach E_n (und kürzen ab $n+\frac{1}{2} = I$). Wir benutzen das Resultat von vorhin, dass

$$\tfrac{x_0^2}{2} \;=\; \frac{2E}{\sqrt{1+4\beta E}\,+1}$$

die positive Lösung der quadratischen Gleichung

$$\tfrac{x_0^2}{2} \,+\, \beta\,\big(\tfrac{x_0^2}{2}\big)^2 \;=\; E$$

ist. Also ist

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{2I}{\sqrt{1+4(-\frac{3}{8}\beta)I}\,+1} \\ &= \frac{2I}{\sqrt{1-\frac{3}{2}\beta I}\,+1} \\ &\approx \frac{2I}{1-\frac{3}{4}\beta I+1} \\ &= \frac{I}{1-\frac{3}{8}\beta I} \\ &\approx I \,+\, \tfrac{3}{8}\beta I^2 \\ &= n \,+\, \tfrac{1}{2} \,+\, \tfrac{3\beta}{8}\,\big(n^2 \,+\, n \,+\, \tfrac{1}{4}\big) \end{aligned} \tag{12}$$

Fassen wir unsere Resultate in einem Theorem zusammen:

Theorem 4.2.1: Gegeben sei der dimensionslose Hamilton-Operator für den leicht anharmonischen Oszillator ($\beta \ll 1$)

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

Wir betrachten das Eigenwertproblem

$$\hat{H}_\beta\,\varphi_n \;=\; E_n\,\varphi_n \;\; .$$

Berechnen wir dann die E_n's semiklassisch durch die Forderung[2]

$$I(E_n) \;:=\; \frac{2\int_{-x_0}^{x_0}\sqrt{2\left(E_n - \frac{x^2}{2} - \frac{\beta}{4}\,x^4\right)}\;dx}{2\pi} \;\stackrel{!}{=}\; n + \frac{1}{2}$$

mit $x_0 = x_0(E_n)$ gegeben durch $\frac{x_0^2}{2} + \frac{\beta}{4}\,x_0^4 \;=\; E_n$, dann bekommen wir

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

Dieses Resultat wollen wir dann nächste Woche mit einem numerischen Test verifizieren.

[2] diese Berechnungsmethode wird dann also als Bohr-Sommerfeld Quantisierung bezeichnet