VL13: Kapitel 4.2.2: 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

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

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

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

In dem Theorem 4.1.2, 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:

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

Dimensionslose und Dimensionsbehaftete Gleichung

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

$$i\hbar\tfrac{\partial}{\partial t}\,\psi = \hat{H}_\lambda\,\psi = \hbar\omega\hat{H}_\beta\,\psi \qquad (5)$$

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 $\tau := \omega t$,

$$i\tfrac{\partial}{\partial\tau}\,\psi = \hat{H}_\beta\,\psi \qquad (6)$$

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

$$\psi = \psi(\xi,\tau) \qquad (7)$$

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

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

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

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

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

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

mit

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

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 4.2.1 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

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

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

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

[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

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

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

..machen wir nächste Woche.