

**VL14: Kapitel 4.2.2: Zeitevolution für den leicht anharmonischen Oszillator:  
 Numerischer Test der Collapse and Revivals Formeln**

In der letzte Woche hatten wir die Grösse

$$\langle \xi \rangle_\tau := \int_{\mathbb{R}} \xi |\psi_\tau(\xi)|^2 d\xi$$

mit

$$\psi_\tau(\xi) = (e^{-i\tau \hat{H}_\beta} \psi_0)(\xi)$$

$$\psi_0(\xi) := h_0(\xi - \xi_0) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{(\xi - \xi_0)^2}{2}}$$

näherungsweise mit Hilfe der Bohr-Sommerfeld Quantisierung berechnet. Der dimensionslose Hamilton-Operator  $\hat{H}_\beta$  für den quantenmechanischen anharmonischen Oszillator war dabei gegeben durch

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

Wir hatten dann das folgende Resultat bekommen:

$$\langle \xi \rangle_\tau \stackrel{\text{Bohr Sommerfeld Approx}}{\approx} \xi_0 \times e^{-\frac{\xi_0^2}{2} [1 - \cos \alpha \tau]} \times \cos \left[ \left(1 + \frac{3\beta}{4}\right) \tau + \frac{\xi_0^2}{2} \sin \alpha \tau \right] \quad (1)$$

mit

$$\alpha := \frac{3}{4} \beta$$

Für  $\beta = 10^{-3}$  oder  $\beta = 10^{-4}$ , für solche Werte hatte die Bohr-Sommerfeld Näherung recht gut funktioniert, ist der letzte cosinus in (1) im wesentlichen ein  $\cos \tau$ ,

$$\cos \left[ \left(1 + \frac{3\beta}{4}\right) \tau + \frac{\xi_0^2}{2} \sin \alpha \tau \right] \stackrel{\alpha \ll 1}{\approx} \cos \left[ \left(1 + \frac{3\beta}{4}\right) \tau \right] \stackrel{\beta \ll 1}{\approx} \cos \tau$$

Wie wir gleich sehen werden, sind die Revival-Zeiten proportional zu  $1/\beta$ , so dass wir für  $\beta = 10^{-3}$  oder  $\beta = 10^{-4}$  dann Zeitintervalle von  $\tau \in [0, 10^3]$  oder  $\tau \in [0, 10^4]$  betrachten wollen, auf solchen Zeitskalen ist dann das  $\cos \tau$  also eine hochfrequente harmonische Schwingung.

Die Collapse and Revivals werden generiert von dem Amplitudenfaktor

$$\exp \left\{ -\frac{\xi_0^2}{2} [1 - \cos \alpha \tau] \right\} = \exp \left\{ -\frac{\xi_0^2}{2} [1 - \cos(\frac{3}{4} \beta \tau)] \right\} \quad (2)$$

in (1). Für

$$\tau \in \left\{ 0, \frac{8\pi}{3\beta}, 2 \times \frac{8\pi}{3\beta}, 3 \times \frac{8\pi}{3\beta}, \dots \right\}$$

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

$$\tau_R = \frac{8\pi}{3\beta} \quad (3)$$

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

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

oder

$$\tau_C = \frac{8}{3\beta\xi_0} = \frac{\tau_R}{\pi\xi_0} \quad (4)$$

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

## Numerischer Test

Wir wollen das Resultat aus (1) mit der exakten Dynamik vergleichen. Wir benutzen wieder die Basis

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

und erinnern uns an die Matrix-Darstellung von  $\hat{H}_\beta$  bezüglich  $B_N$ . Diese hatten wir in dem [week12.pdf](#) hergeleitet und dann in dem

`BohrSommerfeld-vs-exact-AnharmonicOscillator.R`

implementiert. Die Matrix-Elemente waren gegeben durch

$$\langle h_n, \hat{H}_\beta h_m \rangle = (n + \frac{1}{2}) \delta_{n,m} + \frac{\beta}{16} \langle h_n, (a^+ + a)^4 h_m \rangle \quad (5)$$

mit

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

Bezeichnen wir die  $(N + 1) \times (N + 1)$  Matrix mit Matrix-Elementen gegeben durch (5) 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  $j = 0, \dots, N$  und, sagen wir,  $\varepsilon_0 \leq \varepsilon_1 \leq \dots \leq \varepsilon_N$ . Die Standardbasis in  $\mathbb{C}^{N+1}$  entspricht dann also den  $h_0, h_1, \dots, h_N$  und der Anfangszustand  $\psi_0$  ist gegeben durch den Vektor (siehe Theorem 4.1.2b aus dem week10.pdf)

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

mit  $c = \xi_0/\sqrt{2}$ . Um die exakte Dynamik von  $\psi_0$  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

$$c_n(\tau) := \sum_{j=0}^N \langle \psi_0, v_j \rangle e^{-i\varepsilon_j \tau} \langle v_j, h_n \rangle \quad (6)$$

Das exakte  $\langle \xi \rangle_\tau$  ist dann gegeben durch

$$\begin{aligned} \langle \xi \rangle_\tau &= \langle \psi_\tau, \xi \psi_\tau \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \psi_\tau, (a^+ + a) \psi_\tau \rangle = \frac{2}{\sqrt{2}} \operatorname{Re} \{ \langle \psi_\tau, a^+ \psi_\tau \rangle \} \\ &= \sqrt{2} \operatorname{Re} \left\{ \sum_{n=0}^N c_n(\tau) \sum_{m=0}^N \overline{c_m(\tau)} \times \langle h_n, a^+ h_m \rangle \right\} \\ &= \sqrt{2} \operatorname{Re} \left\{ \sum_{n,m=0}^N c_n(\tau) \overline{c_m(\tau)} \times \langle h_n, \sqrt{m+1} h_{m+1} \rangle \right\} \\ &= \sqrt{2} \operatorname{Re} \left\{ \sum_{m=0}^{N-1} c_{m+1}(\tau) \overline{c_m(\tau)} \sqrt{m+1} \right\} \end{aligned}$$

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

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

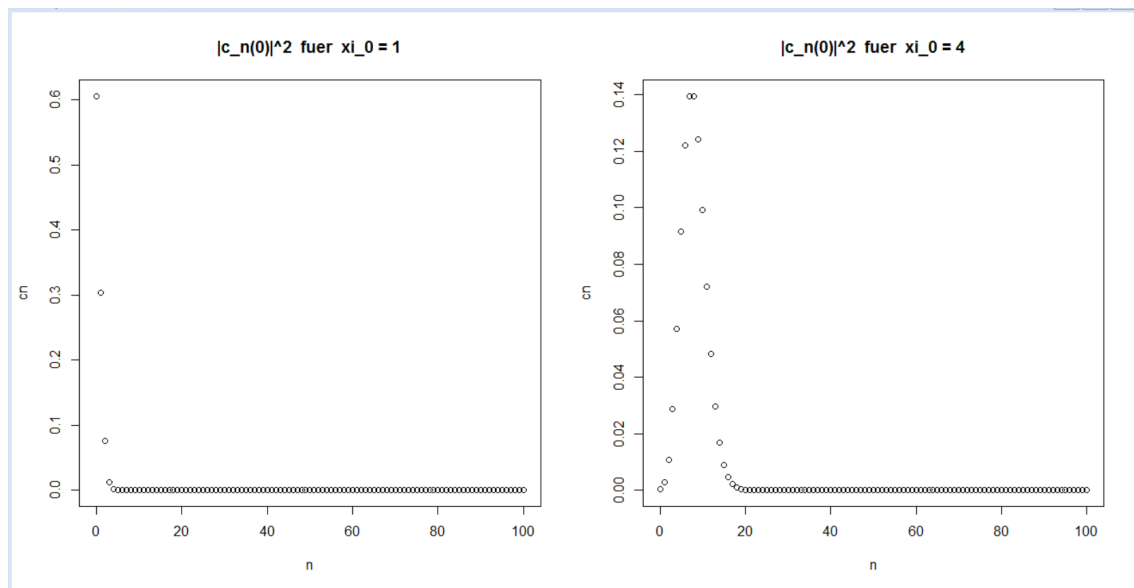
Wegen

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

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

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

für das  $\psi_0$  an:

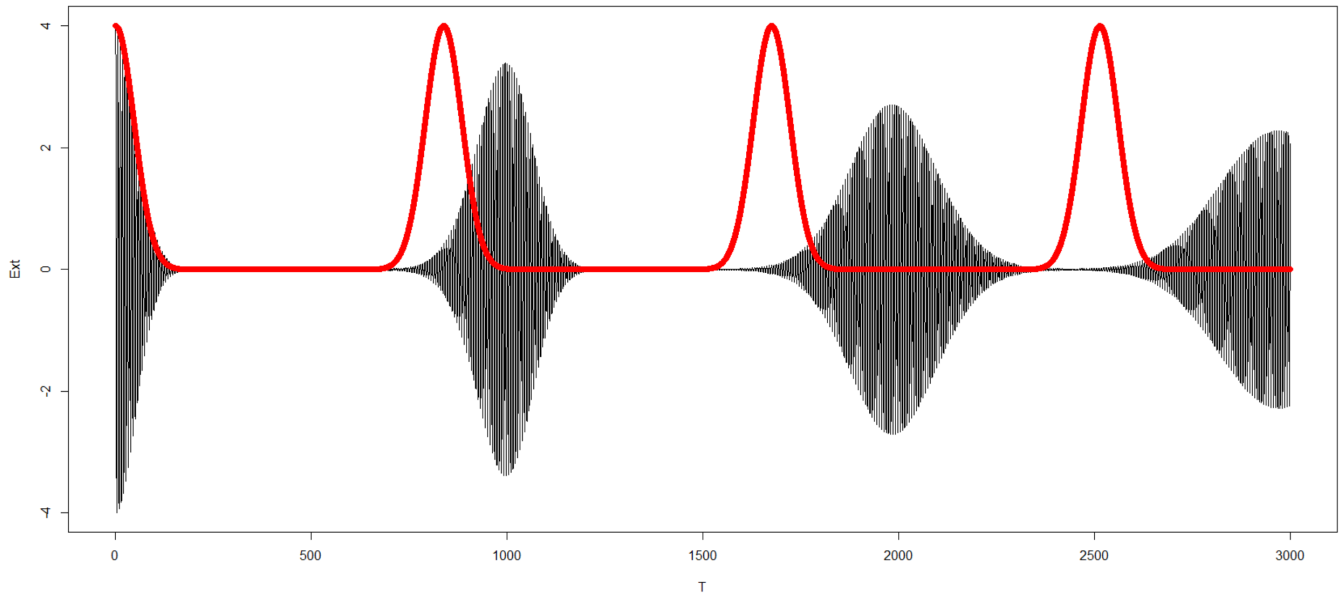


Für die numerische Berechnung der exakten Dynamik sollte es also keine Einschränkung sein, wenn wir etwa

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

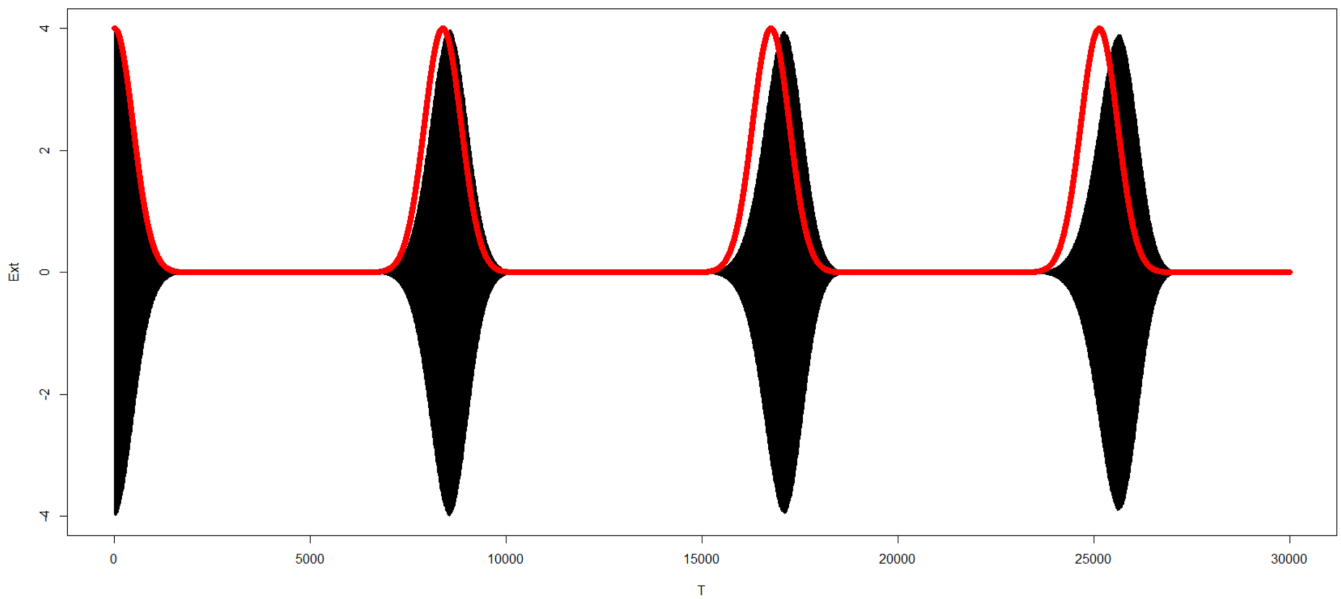
setzen. D.h., wir benutzen eine  $500 \times 500$  Matrix zur Berechnung der exakten Eigenwerte und Eigenvektoren, benutzen davon aber jeweils nur die ersten 150. Wir bekommen dann die folgenden Resultate, die exakte Dynamik in schwarz und die semiklassische Approximation in rot. Zunächst die Bilder 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  $\xi_0 = 4$ :

$\langle x(t) \rangle$ , exact vs. semiclassical approximation,  $\beta = 10^{-2}$

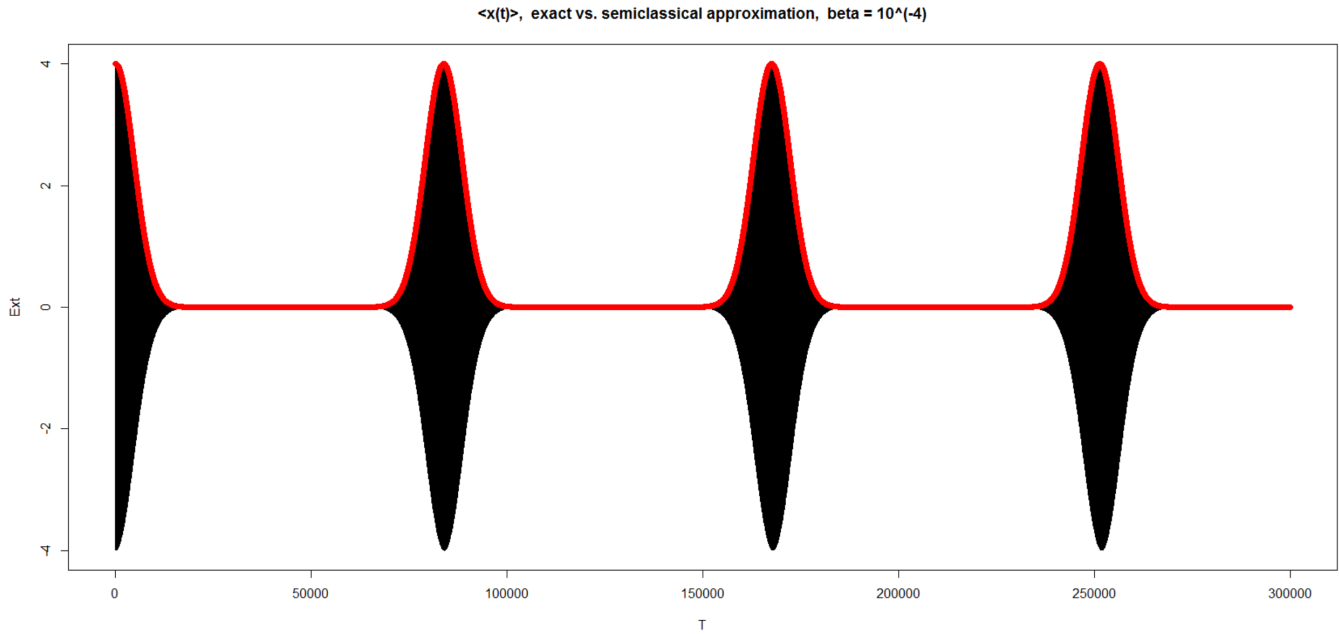


$\langle \xi_t \rangle$  für  $\xi_0 = 4$  und  $\beta = 10^{-2}$

$\langle x(t) \rangle$ , exact vs. semiclassical approximation,  $\beta = 10^{-3}$

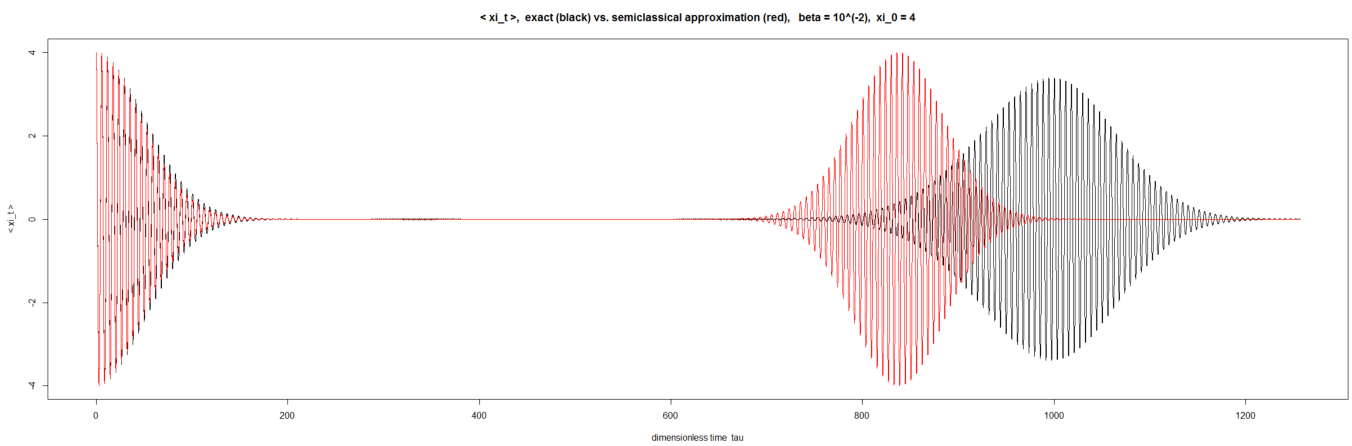


$\langle \xi_t \rangle$  für  $\xi_0 = 4$  und  $\beta = 10^{-3}$

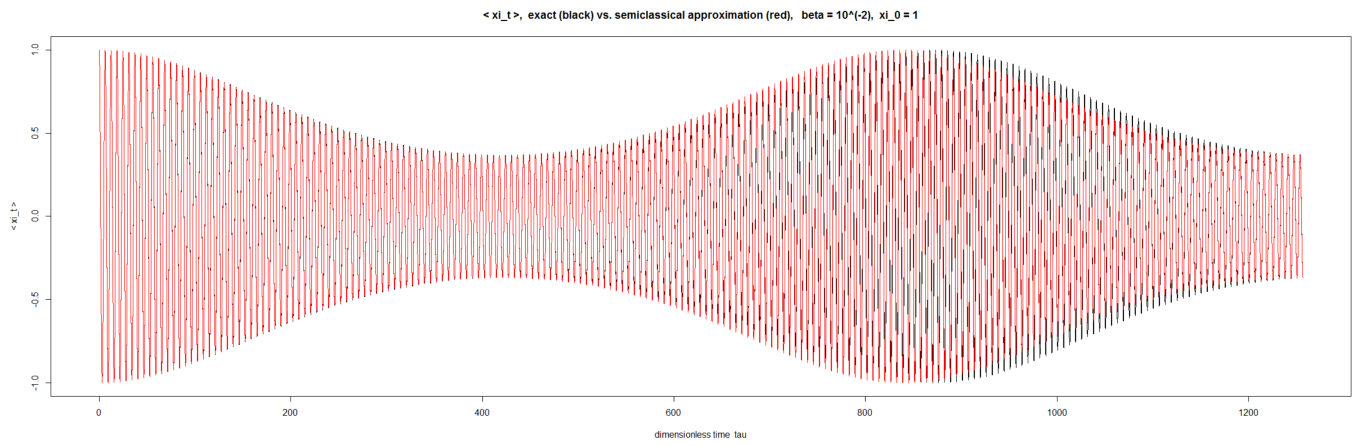


$\langle \xi_t \rangle$  für  $\xi_0 = 4$  und  $\beta = 10^{-4}$

Dabei zeigt die rote Kurve nur den Amplitudenfaktor (2). Wenn man die volle Approximation (1) 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:

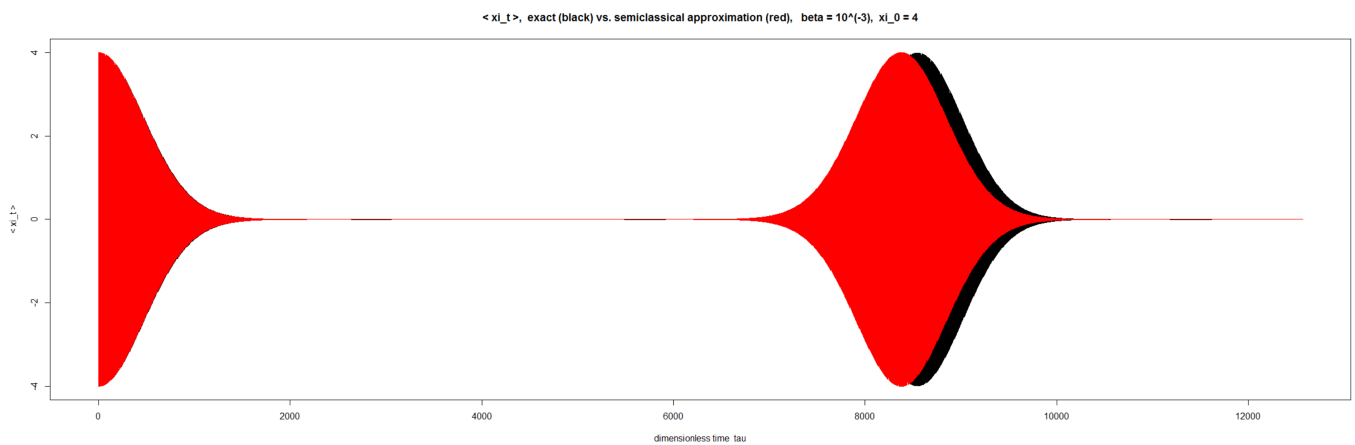


$\langle \xi_t \rangle$  für  $\xi_0 = 4$  und  $\beta = 10^{-2}$

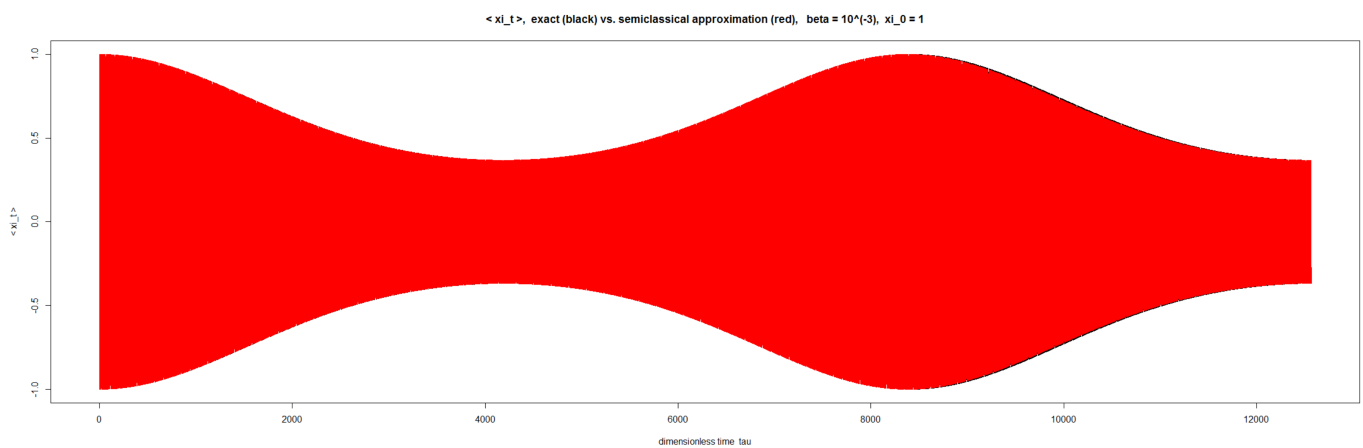


$\langle \xi_t \rangle$  für  $\xi_0 = 1$  und  $\beta = 10^{-2}$

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  $\beta = 10^{-3}$