

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

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

berechnet mit dem Resultat

$$\langle x_t \rangle = x_0 \cos(\omega t), \quad (2)$$

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

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{D}{2} x^2 + \frac{\lambda}{4} x^4 \quad (3)$$

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

$$\begin{aligned} \hat{H}_\lambda &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{D}{2} x^2 + \frac{\lambda}{4} x^4 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 + \frac{\lambda}{4} x^4 \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left\{ -\frac{\hbar}{m\omega} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar} x^2 + \frac{\lambda}{2\hbar\omega} x^4 \right\} \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left\{ -\ell^2 \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{\ell^2} x^2 + \frac{\lambda\ell^4}{2\hbar\omega} \frac{x^4}{\ell^4} \right\} \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left\{ -\frac{d^2}{[d(x/\ell)]^2} + (x/\ell)^2 + \frac{2\lambda\ell^4}{\hbar\omega} \frac{x^4}{4\ell^4} \right\} \\ &= \hbar\omega \left[\frac{1}{2} \left\{ -\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right\} + \frac{\beta}{4} \xi^4 \right] \end{aligned} \quad (4)$$

mit der Länge

$$\ell := \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

und der dimensionslosen Grösse

$$\xi := \frac{x}{\ell}$$

und dem anharmonischen Kopplungsparameter

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

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

$$\hat{H}_\beta := \frac{1}{2} \left\{ -\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right\} + \frac{\beta}{4} \xi^4 \quad (5)$$

Für $\beta = 0$ ist das der harmonische Oszillator und das Eigenwertproblem hatten wir in dem [week9.pdf](#) gelöst,

$$\hat{H}_{\beta=0} h_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) h_n$$

mit den Hermite-Funktionen

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

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-Funktion¹

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

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

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

Die Impulse sind also gegeben durch

$$p_t = \pm \sqrt{2 \left(E - \frac{x_t^2}{2} - \frac{\beta}{4} x_t^4 \right)}$$

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)

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

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

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

$$I(E_n) \stackrel{!}{=} n + \frac{1}{2} \quad (7)$$

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)

$$\begin{aligned}
I(E) &= \frac{1}{\pi} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{2\left(E - \frac{x^2}{2}\right)} dx \\
&= \frac{1}{\pi} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{2\left(\frac{x_0^2}{2} - \frac{x^2}{2}\right)} dx \\
&= \frac{x_0}{\pi} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{1 - \left(\frac{x}{x_0}\right)^2} dx \\
&= \frac{x_0^2}{\pi} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{1 - \left(\frac{x}{x_0}\right)^2} d\left(\frac{x}{x_0}\right) \\
&= \frac{x_0^2}{\pi} \int_{-1}^1 \sqrt{1 - v^2} dv \\
&= \frac{x_0^2}{\pi} \frac{\pi}{2} = \frac{x_0^2}{2} = E
\end{aligned}$$

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)

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

Jetzt benutzen wir die Näherung

$$\sqrt{x+h} = \sqrt{x} + \frac{1}{2\sqrt{x}} h + O(h^2) \quad (8)$$

und approximieren

$$\begin{aligned}
 I(E) &= \frac{x_0^2}{\pi} \int_{-1}^1 \sqrt{1 - v^2 + \frac{\beta x_0^2}{2} (1 - v^4)} dv \\
 &\approx \frac{x_0^2}{\pi} \int_{-1}^1 \left\{ \sqrt{1 - v^2} + \frac{1}{2\sqrt{1 - v^2}} \frac{\beta x_0^2}{2} (1 - v^4) \right\} dv \\
 &= \frac{x_0^2}{\pi} \left\{ \frac{\pi}{2} + \frac{\beta x_0^2}{4} \int_{-1}^1 \frac{1 - v^4}{\sqrt{1 - v^2}} dv \right\}
 \end{aligned}$$

Wir haben

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

und damit

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

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

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

und damit

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

Wir benutzen erneut die Näherung (8) und erhalten

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

Damit bekommen wir

$$\begin{aligned} \frac{x_0^4}{4} &= \left(\frac{x_0^2}{2}\right)^2 = E^2\{1 - \beta E + O(\beta^2)\}^2 \\ &= E^2\{1 - 2\beta E + O(\beta^2)\} \end{aligned}$$

Das setzen wir ein in Gleichung (9) und erhalten

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

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

$$I(E_n) \stackrel{!}{=} n + \frac{1}{2} \quad (11)$$

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

$$E_n - \frac{3}{8} \beta E_n^2 = n + \frac{1}{2}$$

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

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

die positive Lösung der quadratischen Gleichung

$$\frac{x_0^2}{2} + \beta \left(\frac{x_0^2}{2}\right)^2 = E$$

ist. Also ist

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{2I}{\sqrt{1+4(-\frac{3}{8}\beta)I} + 1} \\ &= \frac{2I}{\sqrt{1-\frac{3}{2}\beta I} + 1} \\ &\approx \frac{2I}{1 - \frac{3}{4}\beta I + 1} \\ &= \frac{I}{1 - \frac{3}{8}\beta I} \\ &\approx I + \frac{3}{8}\beta I^2 \\ &= n + \frac{1}{2} + \frac{3\beta}{8} \left(n^2 + n + \frac{1}{4}\right) \end{aligned} \quad (12)$$

Fassen wir unsere Resultate in einem Theorem zusammen:

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

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

Wir betrachten das Eigenwertproblem

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

Berechnen wir dann die E_n 's semiklassisch durch die Forderung²

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

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

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

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

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