

VL12 Kapitel 4.2: Quantenmechanischer anharmonischer Oszillator 4.2.1 Numerischer Test der Bohr-Sommerfeld Quantisierung

Letzte Woche hatten wir das folgende Theorem bewiesen:

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 Forderung¹

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

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

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

Diese Aussage wollen wir jetzt durch eine numerische Simulation überprüfen:

Numerischer Test

Das \hat{H}_β ist als Operator von $L^2(\mathbb{R})$ nach $L^2(\mathbb{R})$ auf einem unendlich-dimensionalen Raum definiert. Wir wissen aber, dass wir den Raum $L^2(\mathbb{R})$ aller quadrat-integrablen Funktionen durch die h_n 's erzeugen können, das Funktionensystem $\{h_n\}_{n=0}^\infty$ bildet eine Orthonormalbasis von $L^2(\mathbb{R})$. Wenn wir also das \hat{H}_β durch eine endlich-dimensionale Matrix approximieren wollen, von der wir dann numerisch die Eigenwerte berechnen können, können wir das etwa folgendermassen tun: Wir wählen die Basis

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

etwa mit $N = 1000$ oder $N = 3000$, von Matrizen dieser Grösse kann man numerisch noch relativ problemlos die Eigenwerte berechnen, und betrachten das \hat{H}_β also auf dem Raum, der

¹diese Berechnungsmethode wird dann also als Bohr-Sommerfeld Quantisierung bezeichnet

durch diese Basis B_N generiert wird. Um die Matrix-Darstellung von \hat{H}_β bezüglich dieser Basis zu finden, schreiben wir das \hat{H}_β mit Hilfe der a und a^+ . Wir wissen bereits, dass

$$\frac{1}{2} \left\{ -\frac{d^2}{dx^2} + \xi^2 \right\} = a^+ a + \frac{1}{2}$$

und müssen noch das ξ^4 durch die a und a^+ ausdrücken. Aus der Definition der a und a^+ folgt

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a^+ + a) \\ \xi^4 &= \frac{1}{4}(a^+ + a)^4 \end{aligned}$$

Nun gilt das folgende

Lemma 4.2.2: Es gilt die folgende Darstellung:

$$\begin{aligned} (a^+ + a)^4 &= (a^+)^4 + (a^+)^2(4\hat{n} + 6) + a^2(4\hat{n} - 2) + a^4 + 6\hat{n}(\hat{n} + 1) + 3 \\ &= (a^+)^4 + (a^+)^2(4\hat{n} + 6) + (4\hat{n} + 6)a^2 + a^4 + 6\hat{n}(\hat{n} + 1) + 3 \end{aligned}$$

mit dem Operator

$$\hat{n} := a^+ a .$$

Beweis: Steht in der Loesung11.pdf zum Übungsblatt 11. ■

Jetzt erinnern wir uns an die Formeln

$$\begin{aligned} a h_n &= \sqrt{n} h_{n-1} \\ a^+ h_n &= \sqrt{n+1} h_{n+1} \end{aligned}$$

und

$$a^+ a h_n = \hat{n} h_n = n h_n .$$

Damit können wir die Matrix-Elemente $\langle h_m, \xi^4 h_n \rangle = \frac{1}{4} \langle h_m, (a^+ + a)^4 h_n \rangle$ jetzt angeben:

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

und wir bekommen insgesamt

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

Wir müssen also die Eigenwerte der folgenden Matrix berechnen:

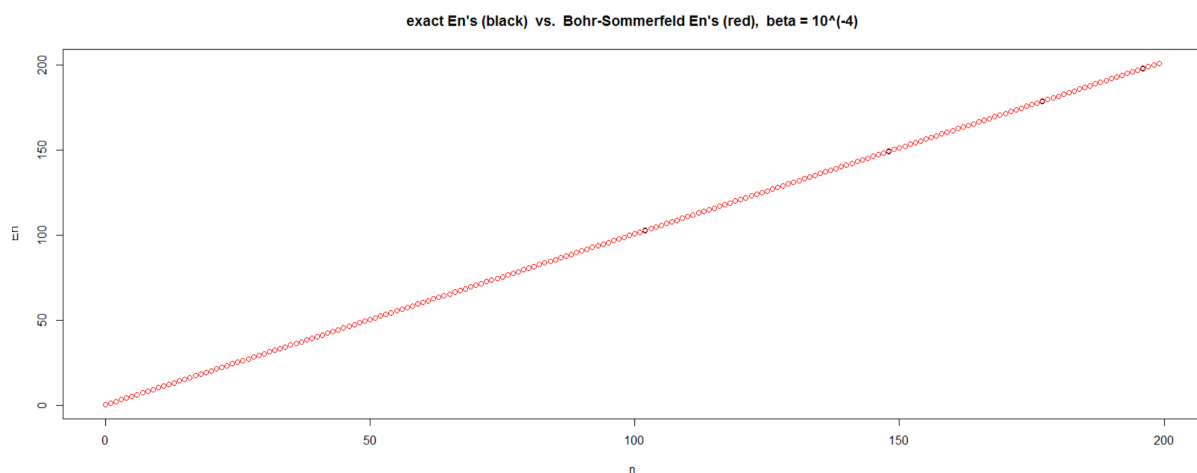
$$\hat{H}_\beta = \text{diag}\left(0 + \frac{1}{2}, 1 + \frac{1}{2}, \dots, N + \frac{1}{2}\right) + \frac{\beta}{16} \hat{H}_{\text{quartic}}$$

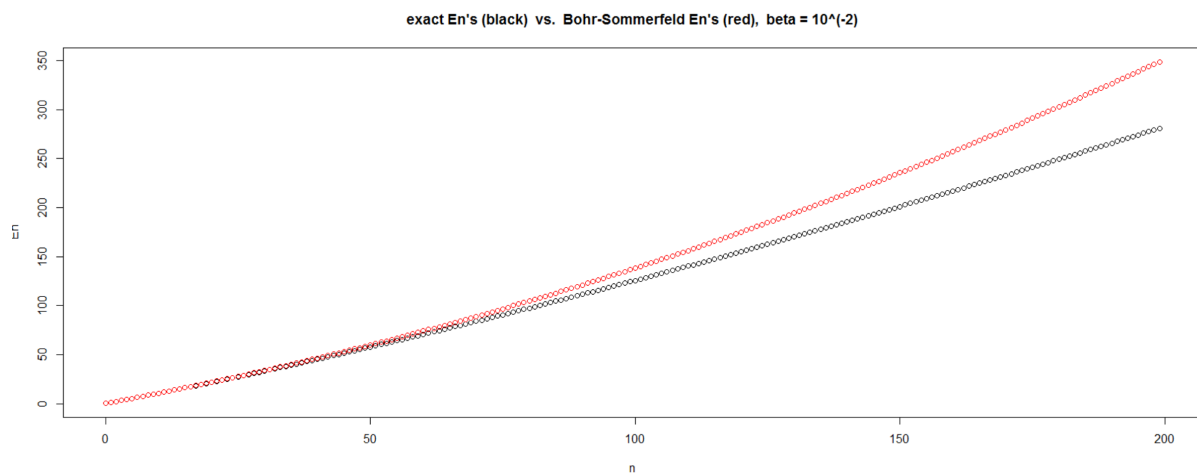
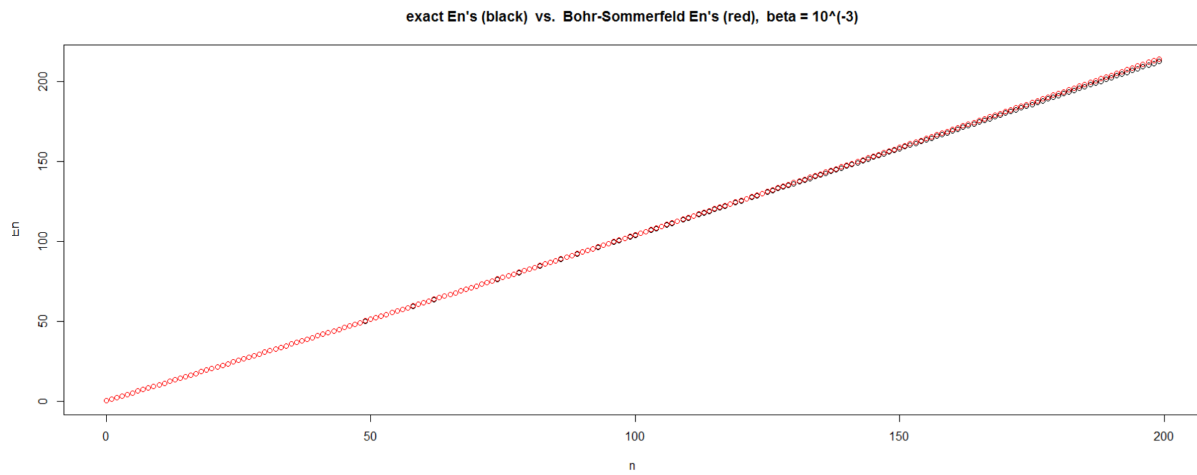
mit

$$\hat{H}_{\text{quartic}} =$$

$$\begin{pmatrix} 3 & 0 & 6\sqrt{1 \cdot 2} & 0 & \sqrt{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4} & 0 & 0 \\ 0 & 6 \cdot 1 \cdot 2 + 3 & 0 & 10\sqrt{2 \cdot 3} & 0 & \sqrt{2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5} & 0 \\ 6\sqrt{1 \cdot 2} & 0 & 6 \cdot 2 \cdot 3 + 3 & 0 & 14\sqrt{3 \cdot 4} & 0 & \ddots \\ 0 & 10\sqrt{2 \cdot 3} & 0 & 6 \cdot 3 \cdot 4 + 3 & 0 & \ddots & \\ \sqrt{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4} & 0 & 14\sqrt{3 \cdot 4} & 0 & \ddots & & \\ 0 & \sqrt{2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5} & 0 & \ddots & & & \\ 0 & 0 & \ddots & & & & \end{pmatrix}$$

Damit erhält man dann die folgenden Bilder, mit $N = 1000$ und $\beta \in \{10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}\}$, für die 200 kleinsten Eigenwerte E_n :





Für kleine β 's sieht das also ziemlich gut aus. Nächste Woche berechnen wir dann die Dynamik fuer diesen leicht anharmonischen Oszillator, die Grösse

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

und wollen dann also verstehen, wo diese Collapse and Revival Phasen, die man auf den Bildern auf der VL-homepage sehen kann, herkommen.