

**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

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

und dem dimensionslosen Operator<sup>1</sup>

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

mit

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

Wir wählen denselben Anfangszustand  $\psi_0$ , den wir auch schon bei der Zeitevolution des harmonischen Oszillators betrachten haben. Das war

$$\psi_0(x) = \varphi_0(x - x_0) = \frac{1}{\sqrt{\ell}} h_0\left(\frac{x-x_0}{\ell}\right) = \frac{1}{\sqrt{\ell}} h_0(\xi - \xi_0) \quad (3)$$

mit der nullten Hermite-Funktion

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

und

$$\xi_0 = \frac{x_0}{\ell}.$$

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:

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

---

<sup>1</sup>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

$$c = \frac{\xi_0}{\sqrt{2}} .$$

Die Zeitevolution des Anfangszustandes  $\psi_0$  unter dem anharmonischen Hamilton-Operator (1) können wir jetzt also folgendermassen schreiben:

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

## Dimensionslose und Dimensionsbehaftete Gleichung

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H}_\lambda \psi = \hbar\omega \hat{H}_\beta \psi \quad (5)$$

und ist äquivalent zu der dimensionslosen Gleichung, wir teilen (5) einfach durch  $\hbar\omega$ ,

$$i \frac{\partial}{\partial(\omega t)} \psi = \hat{H}_\beta \psi$$

oder, mit der dimensionslosen Variablen  $\tau := \omega t$ ,

$$i \frac{\partial}{\partial \tau} \psi = \hat{H}_\beta \psi \quad (6)$$

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

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

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

$$\psi = \psi\left(\frac{x}{\ell}, \omega t\right) \quad (8)$$

Hat  $\psi$  die Norm 1 im  $\xi$ -Raum, dann müssen wir, wenn wir eine normierte Lösung im  $x$ -Raum haben wollen, noch durch  $\sqrt{\ell}$  teilen, also

$$\tilde{\psi}(x, t) := \frac{1}{\sqrt{\ell}} \psi\left(\frac{x}{\ell}, \omega t\right) \quad (9)$$

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

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

mit

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

und  $c := \xi_0/\sqrt{2}$ .

## Implementierung der Bohr-Sommerfeld Quantisierung

Wir machen jetzt die folgende Näherung<sup>2</sup>:

$$e^{-i\tau\hat{H}_\beta} h_n \approx e^{-iE_n\tau} h_n \quad (12)$$

mit den  $E_n$ 's aus dem Theorem 4.2.1 von `week11.pdf`, das war die folgende Formel:

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

Damit bekommen wir dann also

$$\psi_\tau(\xi) \equiv \psi(\xi, \tau) \approx e^{-\frac{c^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c^n}{\sqrt{n!}} e^{-iE_n\tau} h_n(\xi) \quad (14)$$

Jetzt können wir die Grösse  $\langle x_t \rangle$  berechnen. Zunächst mal ist

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

und wir erhalten mit der Näherung (14)

$$\begin{aligned} \langle \xi_\tau \rangle &= e^{-c^2} \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{c^m}{\sqrt{m!}} \frac{c^n}{\sqrt{n!}} e^{-iE_m\tau} e^{+iE_n\tau} \langle h_m, \xi h_n \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-c^2} \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{c^m}{\sqrt{m!}} \frac{c^n}{\sqrt{n!}} e^{-i(E_m - E_n)\tau} \langle h_m, (a + a^+) h_n \rangle \end{aligned} \quad (15)$$

Nun ist

$$\begin{aligned} \langle h_m, (a + a^+) h_n \rangle &= \langle a^+ h_m, h_n \rangle + \langle h_m, a^+ h_n \rangle \\ &= \sqrt{m+1} \langle h_{m+1}, h_n \rangle + \sqrt{n+1} \langle h_m, h_{n+1} \rangle \\ &= \sqrt{m+1} \delta_{m+1,n} + \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} \end{aligned}$$

Wenn wir das in (15) einsetzen, bekommen wir

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

---

<sup>2</sup>das ist also nicht nur eine Näherung für die Eigenwerte, sondern wir nehmen auch an, dass der Einfluss der Anharmonizität für kleine  $\beta$  auf die Eigenfunktionen vernachlässigbar ist

In der ersten Summe von (16) tun wir den Summationsindex von  $m$  nach  $n$  umbenennen und schreiben

$$\begin{aligned}
\langle \xi_\tau \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-c^2} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c^{2n+1}}{n!} e^{+i(E_{n+1}-E_n)\tau} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c^{2n+1}}{n!} e^{-i(E_{n+1}-E_n)\tau} \right\} \\
&= \frac{c}{\sqrt{2}} e^{-c^2} 2 \operatorname{Re} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c^{2n}}{n!} e^{+i(E_{n+1}-E_n)\tau} \right\} \\
&= \xi_0 \times \operatorname{Re} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c^{2n}}{n!} e^{-c^2} e^{+i(E_{n+1}-E_n)\tau} \right\} \tag{17}
\end{aligned}$$

Jetzt benutzen wir die Gleichung (13),

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

und bekommen

$$\begin{aligned}
E_{n+1} - E_n &= 1 + \frac{3\beta}{8} + \frac{3\beta}{8}(2n+1) \\
&= 1 + \frac{3\beta}{4} + \frac{3\beta}{4}n \\
&=: \tilde{\omega} + \alpha n
\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
\tilde{\omega} &:= 1 + \frac{3\beta}{4} \\
\alpha &:= \frac{3}{4}\beta .
\end{aligned}$$

Damit erhalten wir für die Summe in dem Realteil in (17)

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{\infty} \frac{c^{2n}}{n!} e^{-c^2} e^{+i(E_{n+1}-E_n)\tau} &= e^{i\tilde{\omega}\tau} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c^{2n}}{n!} e^{-c^2} e^{i\alpha n\tau} \\
&= e^{i\tilde{\omega}\tau} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(c^2 e^{i\alpha\tau})^n}{n!} e^{-c^2} \\
&= e^{i\tilde{\omega}\tau} e^{c^2 e^{i\alpha\tau}} e^{-c^2} \\
&= e^{i\tilde{\omega}\tau} e^{c^2 \cos \alpha\tau + ic^2 \sin \alpha\tau} e^{-c^2} \\
&= e^{-c^2[1 - \cos \alpha\tau]} \times e^{i[\tilde{\omega}\tau + c^2 \sin \alpha\tau]}
\end{aligned}$$

und bekommen schliesslich das End-Resultat

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

Die Collapse and Revivals werden offensichtlich generiert von dem Amplitudenfaktor

$$\exp\left\{-\frac{\xi_0^2}{2}[1 - \cos \alpha\tau]\right\} = \exp\left\{-\frac{\xi_0^2}{2}\left[1 - \cos\left(\frac{3}{4}\beta\tau\right)\right]\right\} \quad (19)$$

in (18). 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  $\cos \tau = \cos \omega t$ . Die Revival-Zeit ist also gegeben durch

$$\tau_R = \frac{8\pi}{3\beta} \quad (20)$$

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

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

oder

$$\tau_C = \frac{8}{3\beta\xi_0} = \frac{\tau_R}{\pi\xi_0} \quad (21)$$

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

## Numerischer Test

..befindet sich im separatem `week13-NumerischerTest.pdf`.