6.3 Anwendungen; anharmonischer Oszillator (+ Kvgz der Stö.-Reihe)

Sei der $(1d)$ **anharmonische Oszillator** definiert durch [Abb: $V(x)$]

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + g\frac{m^2\omega^3}{4\hbar}\hat{x}^4$$

uns interessieren dessen Eigenzustände und Energieniveaus

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \ , \ E_n = ? \quad (|\psi_n\rangle = ?)$$

(1) Benutzen wir zunächst das (Rayleigh-Ritz) **Variationsprinzip** ($\leftarrow$ §6.1)
$\rightarrow$ obere Schranke für E_0

Vari.: $E_0 \leq \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$ für beliebiges $|\psi\rangle$ ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$)

Ansatz für $|\psi\rangle$: Grundzustand $|0\rangle$ des
harmonischen Oszillators $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2\hat{x}^2$ ($\leftarrow$ §3.6)
mit **Variationsparameter** ω_0

$$\begin{aligned}
E_0 \ &\leq \ \langle 0|\hat{H}_0|0\rangle + \frac{1}{2}m(\omega^2 - \omega_0^2)\langle 0|\hat{x}^2|0\rangle + g\frac{m^2\omega^3}{4\hbar}\langle 0|\hat{x}^4|0\rangle \\
&\quad \text{benutze } \hat{x} = \sqrt{\hbar/2m\omega_0}\,(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \\
&= \ \frac{\hbar\omega_0}{2} + \frac{1}{2}m(\omega^2 - \omega_0^2)\frac{\hbar}{2m\omega_0}\langle 0|(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2|0\rangle + g\frac{m^2\omega^3}{4\hbar}\frac{\hbar^2}{4m^2\omega_0^2}\langle 0|(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^4|0\rangle \\
&\quad \text{benutze } \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \ , \ \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \\
&= \ \frac{\hbar\omega_0}{2} + \frac{\hbar(\omega^2 - \omega_0^2)}{4\omega_0}\underbrace{\cdot 1}_{\hat{a}\hat{a}^\dagger} + g\frac{\hbar\omega^3}{16\omega_0^2}\underbrace{(2\cdot 1 + 1\cdot 1)}_{\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger} \\
&= \ \frac{\hbar\omega}{2}\left\{\frac{\omega_0}{\omega} + \frac{\omega^2 - \omega_0^2}{2\omega\omega_0} + \frac{3g}{8}\frac{\omega^2}{\omega_0^2}\right\}
\end{aligned}$$

minimiere diesen Ausdruck in ω_0

$$\begin{aligned}
\text{Strategie: } \{\} \ &\equiv \ f(\frac{\omega_0}{\omega}, g) \equiv f(x, g) \\
0 \ &\stackrel{!}{=} \ \{\}' = \partial_x f(x,g) \rightarrow \ \text{kubische Glg} \ \rightarrow x_{1,2,3}. \ x_1 \text{ reell} \\
0 \ &\stackrel{!}{<} \ \{\}'' = \partial_x^2 f(x,g)|_{x = x_{\min}} \quad \text{OK für } x_1
\end{aligned}$$

[Abbildung: $(\omega_0/\omega)_{\min}$ vs g; $\{..\}_{\min}$ vs g]
$\rightarrow$ obere Schranke für $E_0(g)$ ist $\{..\}_{\min} \approx 1 + \frac{3g}{8} - \frac{9g^2}{32} + \mathcal{O}(g^3)$

(2) Zwei Anwendungen der (Rayleigh-Schrödinger) **Störungstheorie**: ($\leftarrow$ §6.2)

(2a) **zum Aufwärmen:** Stö. funktioniert.

$$\begin{aligned}\text{Sei }\ \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + g\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \\ &= \hat{H}_0 \qquad\qquad\qquad\quad + g\hat{H}_1, \qquad |g| \ll 1\ ,\ E_n =?\end{aligned}$$

$\hat{H}_0$ bekannt: harm. Osz. (§4)

$$\hat{H}_0|n\rangle = E_{0n}|n\rangle, E_{0n} = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$$

(sehr dummes Beispiel, denn wir kennen die **exakte** Lösung wegen $\hat{H} = \hat{H}_0|_{\omega\to\sqrt{1+g}\omega}$)

$$\begin{aligned}\text{§6.2: }\ E_n &= E_{0n} + \langle n|g\hat{H}_1|n\rangle + O(g^2)\ , \quad \text{benutze } \hat{x} = \sqrt{\hbar/2m\omega}\,(\hat{a}+\hat{a}^\dagger) \\ &= \hbar\omega(n+\frac{1}{2}) + g\frac{1}{2}m\omega^2\frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)^2|n\rangle + O(g^2) \\ &\quad \text{jetzt } \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle\ ,\ \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle\ ,\ \langle n|m\rangle = \delta_{nm} \\ &= \hbar\omega(n+\frac{1}{2}) + \frac{g}{4}\hbar\omega(0+(n+1)+n+0) + O(g^2) \\ &= \hbar\omega(n+\frac{1}{2})[1+\frac{g}{2}+O(g^2)]\end{aligned}$$

(check: $\sqrt{1+g} \approx 1 + \frac{g}{2} + O(g^2)$ OK)

(2b) Nun wollen wir dieselbe Strategie für ein nicht exakt lösbares Problem anwenden: der **anharmonische Oszillator**.

$$\begin{aligned}\text{Sei }\ \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + g\frac{m^2\omega^3}{4\hbar}\hat{x}^4 \\ &= \hat{H}_0 \qquad\qquad\qquad\quad + g\hat{H}_1 \quad \text{mit } |g| \ll 1\end{aligned}$$

Problem: $\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle\ ,\ E_n =?\ \ (|\psi_n\rangle =?)$

$$\begin{aligned}\text{Ansatz: }\ |\psi_n\rangle &= |n\rangle + \sum_{m=1}^{\infty} g^m|\psi_n\rangle^{(m)} \\ E_n &= E_{0n} + \sum_{m=1}^{\infty} g^m E_n^{(m)}\end{aligned}$$

Wie oben schreiben wir $\hat{x}^4 \sim (\hat{a}+\hat{a}^\dagger)^4$

$$\begin{aligned}\hat{H}_1 &= \frac{m^2\omega^3}{4\hbar}\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)^4 \\ &= \frac{\hbar\omega}{16}[\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + +\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} + \text{ weitere Terme}]\end{aligned}$$

damit ist (analog zu oben, $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ etc.)

$$
\begin{aligned}
E_n^{(1)} &= \langle n|\hat{H}_1|n\rangle \\
&= \frac{\hbar\omega}{16}[(n+1)(n+2)+(n+1)^2+n(n+1)+n(n+1)+n^2+n(n-1)+0] \\
&= \frac{3}{8}\hbar\omega[n^2+n+\frac{1}{2}] \\
\Rightarrow\ E_n &= \hbar\omega(n+\frac{1}{2})(1+\frac{3g}{8})+\frac{3g}{8}\hbar\omega n^2+O(g^2)
\end{aligned}
$$

(wir könnten nun auch höhere Korrekturen $g^2, g^3, \ldots$ berechnen)

Bemerkungen:

- Konvergenz? Stö. scheint nur für tiefe E_n-Zustände zu funktionieren, für $|n \cdot g| \ll 1$
- für $g < 0$: kann die Ordnung der E-Zustände ($E_0 \leq E_1 \leq \ldots$) zerstört werden? $E_{n+1} \leq E_n$ für $g \leq -\frac{4}{3(n+1)}$

  [Abbildung: $V(x)$ vs x, für $g > 0$ und für $g < 0$]

  phys. Bild $\rightarrow$ $g > 0$: es existieren Bindungszustände

  $g < 0$: kein Grundzustand endlicher Energie!

  Wellenpaket bei $x = 0$ würde tunneln
- für E_0 alles klar: z.B. $|g| = 0.1 \Rightarrow 3\%$ Korrektur

Für präzisere Aussagen über Konvergenz brauchen wir sicherlich eine Berechnung der höheren Korrekturen.
(siehe z.B. Bender/Wu, Phys. Rev. D vol. 7 (1973) S.1620, §6)

man kann das **asymptotische Verhalten** bestimmen.

Ergebnis (Zitat): für große m gilt

$$E_0^{(m)} = -\hbar\omega\left(\frac{6}{\pi^2}\right)^{1/2}\left(-\frac{3}{4}\right)^m\frac{\Gamma(m+\frac{1}{2})}{\Gamma(1/2)}\left[1-\frac{95}{72}\frac{1}{m}+O\left(\frac{1}{m^2}\right)\right]$$

(Gammafunktion: $\Gamma(n+1) = n!$ für $n \in N$; $\Gamma(x+1) = x\,\Gamma(x)$; $\Gamma(x) = \int_0^\infty dt\, t^{x-1}e^{-t}$ für $x \in R^+$; $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$)

Bemerkungen

- Konvergenz der E_0-Reihe?

  $\left|\frac{g^{m+1}E_0^{(m+1)}}{g^m E_0^{(m)}}\right| \stackrel{m\gg 1}{\approx} \left| -\frac{3m}{4}g\right| \quad \Rightarrow$ konvergiert für **kein** g!

  denn: für $g < 0$ gibt es keinen Grundzustand (s.o.)

  dies wird im analytischen Verhalten der Funktion $E_0(g)$ reflektiert

  (vgl. $\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n$; links: analytische Fkt. in $C\backslash\{1\}$. rechts: konvergiert nur für $|x| < 1$)

- aus physikalischen Gründen (s.o.) können wir annehmen, dass die Entwicklung für $g > 0$ sinnvoll sein sollte.

  $\Rightarrow$ **"asymptotische"** Reihe: gut nur bis zu einem $m_{\max}$

- Sei $f(z)$ analytisch (in einem Sektor $S \in C$)

  ($E_0(g)$ ist analytisch in $g \in C\backslash\{$neg reelle Achse$\}$, s. z.B. Bender/Wu)

  Sei $f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k z^k$ die **asymptotische** Entwicklung für f (in S)

  d.h. sie divergiert für alle $z \neq 0$

  und hat eine Schranke $|f(z) - \sum_{k=0}^{N} f_k z^k| \leq c_{N+1}|z|^{N+1}$ für alle N wobei $c_N|z|^N \stackrel{N\to\infty}{\longrightarrow} \infty$ für alle $z \neq 0$

- die Partialsummen liefern also einen Wert "nah" der Antwort: bei fixiertem z können wir die Schranke über N minimieren, und bekommen eine Abschätzung für f mit endlichem Fehler $\min_{\{N\}} c_N|z|^N$

- in unserem Fall definiert die E_0-Reihe sogar eine **eindeutige** Fkt $E_0(g)$. Grund: $E_0^{(m)} \sim (m!)^1$ **und** $\alpha > \pi$, dann kann man keine in S beschränkte analytische Fkt addieren (ist Null!) (Theorem der Funktionentheorie)

- dieses Verhalten ist typisch für Störungstheorie. Man erhält sehr selten konvergente Reihen, meist asmptotische.

- unsere E_0-Reihe ist "Borel-summierbar": wenn $f_k \sim c(-a)^k k!$ ($a > 0$)

  definiere Borel-Transformierte von $f(z)$

  $B_f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f_k}{k!} z^k$, konvergiert für $|a \cdot z| < 1$

  im Sinne einer Potenzreihe ist dann

  $$f(z) = \int_0^{\infty} dt\ e^{-t} B_f(zt)$$

  die "Borel-summierte" asymptotische Reihe.