

# Untersuchung des Einflusses inexakter Vertauschungsrelationen auf die Zeitentwicklung in Quantensystemen

Bachelorarbeit in Physik  
von Carlo Wenig

-

angefertigt im  
Helmholtz-Institut für Strahlen- und Kernphysik

vorgelegt der  
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät  
der Universität Bonn

-

September 2022

1. Gutachter: Prof. Dr. Carsten Urbach
2. Gutachter: Thomas Luu

Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt, sowie die Zitate kenntlich gemacht habe.

Bonn, 26.09.2022  
Datum

C. Luu  
Unterschrift

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>5</b>
2.1	Diskretisierung . . . . .	5
2.2	Diskreter Ortsoperator . . . . .	5
2.3	Diskrete Zustandskomponenten . . . . .	6
2.4	Translationsoperator und Randbedingungen . . . . .	6
2.4.1	Eigenwerte und Eigenzustände . . . . .	7
2.4.2	Erwartungswerte . . . . .	8
2.5	Diskreter Ortsableitungsoperator . . . . .	9
2.6	Diskreter Impulsoperator und kinetischer Hamiltonoperator . . . . .	10
2.7	Diskreter Potenzialoperator . . . . .	11
2.8	Diskreter Hamiltonoperator und Energiespektrum . . . . .	11
2.9	Kohärente Zustände . . . . .	11
<b>3</b>	<b>Vertauschungsrelation von Ort und Impuls</b>	<b>13</b>
3.1	Fehleroperatoren der diskreten Vertauschungsrelation . . . . .	13
3.2	Erwartungswerte des Fehleroperators . . . . .	14
3.2.1	Bestimmung der Konvergenzordnungen für verschiedene Wellenfunktionen . . . . .	14
3.2.2	Untersuchung der $p$ -Abhängigkeit der Konvergenzordnungen . . . . .	15
3.2.3	Verhalten bei unterschiedlichen Randbedingungen . . . . .	16
3.3	Spektrum des Fehleroperators . . . . .	18
<b>4</b>	<b>Energiespektrum</b>	<b>22</b>
4.1	Analytische Lösung des harmonischen Oszillators . . . . .	22
4.2	Abschätzung der Approximationsfehler im Energiespektrum . . . . .	22
4.3	Numerische Bestimmung des Energiespektrums des harmonischen Oszillators . . . . .	23
4.4	Numerische Bestimmung des Energiespektrums des anharmonischen Oszillators . . . . .	25
4.5	Konvergenz der Eigenenergien . . . . .	25
<b>5</b>	<b>Zeitentwicklung</b>	<b>28</b>
5.1	Numerische Simulation der Zeitentwicklung eines kohärenten Zustands . . . . .	28
5.2	Zeitentwicklung des Mittelwerts eines kohärenten Zustands . . . . .	29
5.3	Diskretisierungsabhängigkeit der Fehler . . . . .	30
<b>6</b>	<b>Fazit</b>	<b>31</b>
<b>A</b>	<b>Approximation von Summen als Integral</b>	<b>32</b>
<b>B</b>	<b>Abschätzung der Translationssummen</b>	<b>32</b>

# 1 Einleitung

Die Quantenmechanik basiert auf unendlichdimensionalen Hilberträumen. Diese exakt zu simulieren ist aufgrund der endlichen Rechenleistung eines Computers nicht möglich, weshalb man auf numerische Approximationen zurückgreifen muss, die auf endlich dimensionalen Vektorräumen durchgeführt werden. Dazu wird der kontinuierliche Ortsraum in eine endliche Menge diskreter Ortspunkte aufgeteilt, die in einem abgeschlossenen Bereich des Raums verteilt sind. Werden in diesem diskreten Raum Operationen wie zum Beispiel eine Ortsableitung durchgeführt, kommt es zwingend zu Approximationsfehlern und Artefakten an den Randpunkten, welche in dieser Arbeit näher untersucht und quantifiziert werden sollen. Konkret widmen sich die Untersuchungen besonders der Vertauschungsrelation von Orts- und Impulsoperator, den Energiespektren und der Zeitentwicklung von Zuständen im diskretisierten Hilbertraum. Es werden verschiedene Approximationen von Impuls- und Hamiltonoperator aus bekannten Methoden für numerische Differentiation hergeleitet, miteinander verglichen und versucht, die Ergebnisse analytisch durch Abschätzungen nachzuvollziehen. Besonders relevant ist hierbei die Konvergenzordnung, welche beschreibt wie schnell der Näherungswert einer Approximationsmethode bei Erhöhung der Ortsauflösung gegen den exakten Wert konvergiert.

Zur Untersuchung von Erwartungswerten und Messwahrscheinlichkeiten müssen konkrete Zustände betrachtet werden. In dieser Arbeit werden dazu kohärente Zustände eines harmonischen Oszillators verwendet, deren Wellenfunktionen durch Gaußkurven gegeben sind. Für eine hinreichend schmale Wahl einer solchen Gaußkurve können die Effekte am Rand des diskretisierten Raums gezielt eingedämmt werden.

Die Analyse der Energiespektren und der Zeitentwicklung wird anhand von harmonischen und anharmonischen Potenzialen durchgeführt. Für harmonische Potenziale können die numerischen Ergebnisse direkt mit der analytischen Lösung verglichen werden, was eine einfache Fehlerbestimmung erlaubt. Bei der Untersuchung der Zeitentwicklung wird sich diese Arbeit auf die Effekte der Ortsdiskretisierung beschränken und die Auswirkung der Zeitdiskretisierung durch eine möglichst exakte Zeitentwicklung begrenzen.

Der Quellcode der numerischen Berechnungen kann unter <https://github.com/carlowenig/bachelorarbeit-public> abgerufen werden.

## 2 Theoretische Grundlagen

Zunächst werden die theoretischen Grundlagen geschaffen, die für die nachfolgenden Untersuchungen relevant sind. Dabei wird eine Diskretisierung des Hilbertraums eingeführt und diskrete Formen des Orts- und Impulsoperators erarbeitet, aus welchen schließlich ein diskreter Hamiltonoperator abgeleitet werden kann. Der Übersichtlichkeit halber wird zur Definition des Impulsoperators zuerst ein Translationsoperator eingeführt und daraus verschiedene Ortsableitungsoperatoren gebildet.

### 2.1 Diskretisierung

Sei  $\mathcal{H}$  der übliche unendlich-dimensionale Hilbertraum, der im Folgenden auch als kontinuierlicher Hilbertraum bezeichnet wird. Zur numerischen Simulation wird ein  $N$ -dimensionaler Hilbertraum  $\mathcal{H}_N$  angesetzt, welcher im Folgenden auch diskreter Hilbertraum genannt wird. Sei weiterhin  $\{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |N-1\rangle\} \subset \mathcal{H}_N$  eine Orthonormalbasis dieses diskreten Hilbertraums, welche im Folgenden als Diskretisierungsbasis bezeichnet wird. Ein beliebiger Zustand<sup>1</sup>  $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_N$  kann dann in der Diskretisierungsbasis dargestellt werden durch

$$|\phi\rangle = \sum_{k=0}^{N-1} \phi_k |k\rangle =: \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \phi_1 \\ \vdots \\ \phi_{N-1} \end{pmatrix},$$

wobei  $\phi_k := \langle k | \phi \rangle$  die Komponenten des Zustands genannt werden. Zudem kann ein Diskretisierungsoperator  $\hat{k}$  definiert werden, dessen Eigenbasis die Diskretisierungsbasis ist, sodass für alle  $k \in \{0, 1, \dots, N-1\}$  die Eigenwertgleichung

$$\hat{k} |k\rangle = k |k\rangle$$

erfüllt sei. Ein beliebiger Operator  $\hat{A}$  im Hilbertraum  $\mathcal{H}_N$  lässt sich dann als  $N \times N$ -Matrix in der Diskretisierungsbasis darstellen, deren Komponenten für  $k, l \in \{0, 1, \dots, N-1\}$  durch  $\langle k | \hat{A} | l \rangle$  gegeben sind. Der Diskretisierungsoperator selbst wird dargestellt durch

$$\hat{k} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & N-1 \end{pmatrix}.$$

### 2.2 Diskreter Ortsoperator

Mithilfe der  $N$  Zustände der Diskretisierungsbasis, können auch  $N$  Ortspunkte repräsentiert werden. Diese werden hier symmetrisch um den Wert 0 gewählt mit einer endlichen Ausdehnung  $d \in (0, \infty)$  in positiver und negativer Richtung. Für alle  $k \in \{0, 1, \dots, N-1\}$  seien somit die Ortspunkte definiert durch

$$x_k := -d + \Delta x \cdot \left(k + \frac{1}{2}\right) \quad \text{mit} \quad \Delta x := \frac{2d}{N}.$$

Nach obigem Ansatz kann der *diskrete* Ortsoperator definiert werden als<sup>2</sup>

$$\hat{X} := -d + \Delta x \cdot \left(\hat{k} + \frac{1}{2}\right),$$

sodass die Eigenbasis von  $\hat{X}$  die Diskretisierungsbasis ist und die Eigenwerte genau den Ortspunkten entsprechen:

$$\hat{X} |k\rangle = \left(-d + \Delta x \cdot \left(k + \frac{1}{2}\right)\right) |k\rangle = x_k |k\rangle.$$

<sup>1</sup>Zustände im diskreten Hilbertraum werden in diesem Dokument mit dem Symbol  $\phi$  gekennzeichnet, während Zustände im kontinuierlichen Hilbertraum mit  $\psi$  symbolisiert werden.

<sup>2</sup>Operatoren im diskreten Hilbertraum werden hier mit einem Großbuchstaben symbolisiert (bspw.  $\hat{X}$ ), Operatoren im kontinuierlichen Hilbertraum mit einem Kleinbuchstaben (bspw.  $\hat{x}$ ).

### 2.3 Diskrete Zustandskomponenten

In einem kontinuierlichen Hilbertraum  $\mathcal{H}$  wird die Wellenfunktion  $\psi(x)$  eines Zustands  $|\psi\rangle$  mit den Ortseigenzuständen  $|x\rangle$  definiert durch  $\psi(x) := \langle x|\psi\rangle$ . Die Eigenzustände des diskreten Ortsoperators  $\hat{X}$  entsprechen den Diskretisierungszuständen  $|k\rangle$ , sodass die Zustandskomponenten  $\phi_k = \langle k|\phi\rangle$  das diskrete Analogon zur Wellenfunktion darstellen. Jedem kontinuierlichen Zustand  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  kann eindeutig ein diskreter Zustand  $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_N$  zugeordnet werden. Dazu wird verlangt, dass für alle  $k \in \{0, 1, \dots, N-1\}$

$$\phi_k = C \cdot \psi(x_k) \quad (1)$$

gelte, wobei  $C \in \mathbb{C}$  ein  $k$ -unabhängiger Vorfaktor ist, der durch die Normierung von  $|\phi\rangle$  festgelegt wird. Diese fordert

$$1 = \langle \phi|\phi\rangle = \sum_{k=0}^{N-1} |\phi_k|^2 = |C|^2 \cdot \sum_{k=0}^{N-1} |\psi(x_k)|^2.$$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann  $C$  reell und positiv gewählt werden, sodass folgt

$$C = \left( \sum_{k=0}^{N-1} |\psi(x_k)|^2 \right)^{-1/2}. \quad (2)$$

Mit der Approximationsformel für Summen über die Wellenfunktion, die in Anhang A hergeleitet wurde, kann der Normierungsfaktor abgeschätzt werden. Dazu wird die Annahme gemacht, dass die ersten  $n$  Ableitungen der Wellenfunktion außerhalb von  $(x_0, x_{N-1})$  verschwinden. Man erhält

$$C = \left( \frac{1}{\Delta x} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 + \mathcal{O}(\Delta x^{n+1}) \right)^{-1/2},$$

sodass aus der Normierung von  $|\psi\rangle$  folgt

$$C = \left( \frac{1}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^{n+1}) \right)^{-1/2} = \sqrt{\Delta x} \cdot \left( 1 + \mathcal{O}(\Delta x^{n+2}) \right)^{-1/2} = \sqrt{\Delta x} \cdot \left( 1 + \mathcal{O}(\Delta x^{n+2}) \right), \quad (3)$$

wobei im letzten Schritt eine Taylorentwicklung der reziproken Wurzel durchgeführt wurde. Numerisch kann  $C$  jedoch exakt berechnet werden, sodass im Folgenden stets der exakte Wert verwendet und auch weiterhin durch  $C$  gekennzeichnet wird. In Abb. 1 werden die Ortspunkte und ein Beispiel einer Wellenfunktion  $\psi(x)$  mit den zugehörigen Zustandskomponenten  $\phi_k$  veranschaulicht.

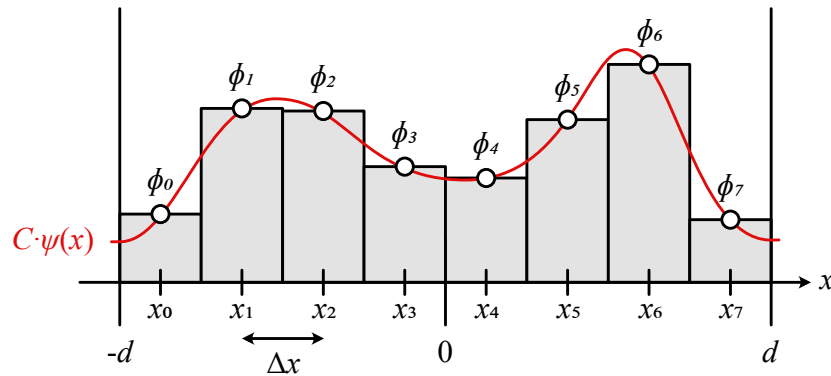


Abbildung 1: Ortspunkte  $x_k$  für  $N = 8$  mit Zustandskomponenten  $\phi_k$  einer beispielhaften Wellenfunktion  $\psi(x)$ .

### 2.4 Translationsoperator und Randbedingungen

Der Translationsoperator  $\hat{T}$  soll einen diskreten Zustand  $|\phi\rangle$  so transformieren, dass jede Komponente  $\phi_k$  auf die jeweils nächste Komponente  $\phi_{k+1}$  abgebildet wird. Die letzte Komponente  $\phi_{N-1}$  soll auf  $R\phi_0$  abgebildet werden, wobei der Wert  $R \in \{0, 1\}$  abhängig von der gewünschten Randbedingung

gewählt werden kann ( $R = 1$  für periodische Randbedingung). Nach diesen Überlegungen wird  $\hat{T}$  definiert durch seine Wirkung auf die Bra-Vektoren der Diskretisierungsbasis:

$$\begin{aligned}\langle k | \hat{T} &:= \langle k+1 | \quad \text{für } k \in \{0, 1, \dots, N-2\}, \\ \langle N-1 | \hat{T} &:= R \langle 0 |.\end{aligned}$$

So gilt für die Komponenten eines transformierten Zustands  $|\phi'\rangle = \hat{T}|\phi\rangle$  in der Tat

$$\begin{aligned}\phi'_k &= \langle k | \hat{T} | \phi \rangle = \langle k+1 | \phi \rangle = \phi_{k+1} \quad \text{für } k \in \{0, 1, \dots, N-2\}, \\ \phi'_{N-1} &= \langle N-1 | \hat{T} | \phi \rangle = R \langle 0 | \phi \rangle = R\phi_0.\end{aligned}$$

Die Matrixkomponenten von  $\hat{T}$  sind gegeben durch

$$\begin{aligned}\langle k | \hat{T} | l \rangle &= \langle k+1 | l \rangle = \delta_{k+1,l} \quad \text{für } k \in \{0, 1, \dots, N-2\}, \\ \langle N-1 | \hat{T} | l \rangle &= R \langle 0 | l \rangle = R\delta_{0,l},\end{aligned}$$

was zu folgender Matrix führt:

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 \\ R & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Man kann zeigen, dass  $\hat{T}$  für  $R = 0$  nicht invertierbar und für  $R = 1$  unitär ist, also  $\hat{T}^{-1} = \hat{T}^\dagger$ . Untersucht man die Wirkung von  $\hat{T}^\dagger = (\hat{T}^*)^T$  auf einen Basis-Bra  $\langle k |$ , so findet man

$$\begin{aligned}\langle k | \hat{T}^\dagger &= \langle k-1 | \quad \text{für } k \in \{1, 2, \dots, N-1\}, \\ \langle 0 | \hat{T}^\dagger &= R \langle N-1 |.\end{aligned}$$

Der hermitesch konjugierte Translationsoperator bildet also jede Zustandskomponente auf die jeweils *vorherige* Komponente ab:

$$\begin{aligned}\phi'_k &= \langle k | \hat{T}^\dagger | \phi \rangle = \langle k-1 | \phi \rangle = \phi_{k-1} \quad \text{für } k \in \{1, 2, \dots, N-1\}, \\ \phi'_0 &= \langle 0 | \hat{T}^\dagger | \phi \rangle = R \langle N-1 | \phi \rangle = R\phi_{N-1}.\end{aligned}$$

Bei der Anwendung von  $\hat{T}$  und  $\hat{T}^\dagger$  auf einen Basiszustand  $|k\rangle$  gilt

$$\begin{aligned}\hat{T} |k\rangle &= \begin{cases} |k-1\rangle & \text{für } k \in \{1, 2, \dots, N-1\} \\ R |N-1\rangle & \text{für } k = 0 \end{cases}, \\ \hat{T}^\dagger |k\rangle &= \begin{cases} |N-1\rangle & \text{für } k \in \{0, 1, \dots, N-2\} \\ R |0\rangle & \text{für } k = N-1 \end{cases}.\end{aligned}$$

#### 2.4.1 Eigenwerte und Eigenzustände

Für die späteren Untersuchungen sind die Eigenwerte und -zustände des Translationsoperators interessant. Die Eigenwertgleichung sei

$$\hat{T} |T_n\rangle = T_n |T_n\rangle,$$

wobei  $n \in \{0, 1, \dots, N-1\}$ . Durch  $N$ -fache Anwendung von  $\hat{T}$  stellt man fest, dass für alle Basiszustände  $|k\rangle$  gilt

$$\hat{T}^N |k\rangle = \hat{T}^{N-1} |k-1\rangle = \dots = \hat{T}^{N-k} |0\rangle = R \cdot \hat{T}^{N-k-1} |N-1\rangle = R |k\rangle,$$

sodass für alle  $n$  folgt

$$T_n^N |T_n\rangle = \hat{T}^N |T_n\rangle = \sum_{k=0}^{N-1} \langle k | T_n \rangle \hat{T}^N |k\rangle = R \cdot |T_n\rangle.$$

Die Eigenwerte sind somit alle gleichermaßen gegeben durch  $T_n = R$ , da  $R \in \{0, 1\}$ . Für die Eigenzustände findet man

$$R|T_n\rangle = \hat{T}|T_n\rangle = \sum_{k=0}^{N-1} \langle k|T_n\rangle \hat{T}|k\rangle = R|N-1\rangle + \sum_{k=1}^{N-1} \langle k|T_n\rangle |k-1\rangle.$$

Für  $R = 0$  muss aufgrund der linearen Unabhängigkeit der Basiszustände also  $\langle k|T_n\rangle = 0$  für alle  $k \in \{1, 2, \dots, N-1\}$  gelten. Die normierten Eigenzustände für  $R = 0$  sind also alle gleichermaßen gegeben durch

$$|T_n\rangle = |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Für  $R = 1$  gilt  $T_n = 1$  und man erhält für  $k \in \{0, 1, \dots, N-2\}$

$$\langle k|T_n\rangle = \langle k|T_n|T_n\rangle = \langle k|\hat{T}|T_n\rangle = \langle k+1|T_n\rangle$$

und

$$\langle N-1|T_n\rangle = \langle N-1|T_n|T_n\rangle = \langle N-1|\hat{T}|T_n\rangle = R\langle 0|T_n\rangle = \langle 0|T_n\rangle,$$

sodass gilt

$$\langle 0|T_n\rangle = \langle 1|T_n\rangle = \dots = \langle N-1|T_n\rangle.$$

Die normierten Eigenzustände für  $R = 1$  sind also alle gleichermaßen gegeben durch

$$|T_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} |k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

### 2.4.2 Erwartungswerte

Auch die Erwartungswerte verschiedener Kombinationen von Translationsoperatoren werden eine große Rolle spielen, weshalb diese auch direkt hier berechnet werden. Der Erwartungswert einer Kombination  $\hat{T}^j(\hat{T}^\dagger)^l$  im Zustand  $|\phi\rangle$  ist gegeben durch

$$\langle \hat{T}^j(\hat{T}^\dagger)^l \rangle = \langle \phi | \hat{T}^j(\hat{T}^\dagger)^l | \phi \rangle = \sum_{k=0}^{N-1} \phi_k^* \langle k | \hat{T}^j(\hat{T}^\dagger)^l | \phi \rangle.$$

Nimmt man an, dass hinreichend viele Randkomponenten des Zustands verschwinden, also

$$\phi_0 = \phi_1 = \dots = \phi_{l-1} = \phi_{N-j} = \phi_{N-j+1} = \dots = \phi_{N-1} = 0,$$

dann gilt

$$\langle \hat{T}^j(\hat{T}^\dagger)^l \rangle = \sum_{k=l}^{N-j-1} \phi_k^* \langle k | \hat{T}^j(\hat{T}^\dagger)^l | \phi \rangle = \sum_{k=l}^{N-j-1} \phi_k^* \langle k+j-l | \phi \rangle = \sum_{k=l}^{N-j-1} \phi_k^* \phi_{k+j-l}.$$

In Anhang B werden diese „Translationssummen“ abgeschätzt, sodass man unter der Annahme, dass die ersten  $n = 6$  Ableitungen der zugehörigen Wellenfunktion  $\psi(x)$  außerhalb von  $(x_j, x_{N-l-1})$  verschwinden, für die Erwartungswerte folgende Abschätzungen erhält:

$$\begin{aligned} \langle \hat{T}^j(\hat{T}^\dagger)^l \rangle &= 1 + (j-l)i\Gamma_1\Delta x + \frac{(j-l)^2}{2}\Gamma_2\Delta x^2 + \frac{(j-l)^3}{6}i\Gamma_3\Delta x^3 \\ &\quad + \frac{(j-l)^4}{24}\Gamma_4\Delta x^4 + \frac{(j-l)^5}{120}i\Gamma_5 + \frac{(j-l)^6}{720}\Gamma_6 + \mathcal{O}(\Delta x^7). \end{aligned}$$



Daraus folgt unter anderem

$$\begin{aligned}\langle \hat{T} \rangle &= 1 + i\Gamma_1 \Delta x + \frac{1}{2}\Gamma_2 \Delta x^2 + \frac{1}{6}i\Gamma_3 \Delta x^3 + \frac{1}{24}\Gamma_4 \Delta x^4 + \frac{1}{120}i\Gamma_5 \Delta x^5 + \frac{1}{720}\Gamma_6 \Delta x^6 + \mathcal{O}(\Delta x^7), \\ \langle \hat{T}^\dagger \rangle &= 1 - i\Gamma_1 \Delta x + \frac{1}{2}\Gamma_2 \Delta x^2 - \frac{1}{6}i\Gamma_3 \Delta x^3 + \frac{1}{24}\Gamma_4 \Delta x^4 - \frac{1}{120}i\Gamma_5 \Delta x^5 + \frac{1}{720}\Gamma_6 \Delta x^6 + \mathcal{O}(\Delta x^7), \\ \langle \hat{T}^2 \rangle &= 1 + 2i\Gamma_1 \Delta x + 2\Gamma_2 \Delta x^2 + \frac{4}{3}i\Gamma_3 \Delta x^3 + \frac{2}{3}\Gamma_4 \Delta x^4 + \frac{4}{15}i\Gamma_5 \Delta x^5 + \frac{4}{45}\Gamma_6 \Delta x^6 + \mathcal{O}(\Delta x^7), \\ \langle (\hat{T}^\dagger)^2 \rangle &= 1 - 2i\Gamma_1 \Delta x + 2\Gamma_2 \Delta x^2 - \frac{4}{3}i\Gamma_3 \Delta x^3 + \frac{2}{3}\Gamma_4 \Delta x^4 - \frac{4}{15}i\Gamma_5 \Delta x^5 + \frac{4}{45}\Gamma_6 \Delta x^6 + \mathcal{O}(\Delta x^7).\end{aligned}$$

Für  $j = l$  findet man

$$\langle \hat{T}^j (\hat{T}^\dagger)^j \rangle = 1.$$

Ebenfalls nützlich wird folgende Relation sein:

$$\langle \hat{T}^j (\hat{T}^\dagger)^l \rangle + \langle \hat{T}^l (\hat{T}^\dagger)^j \rangle = 2 + (j-l)^2 \Gamma_2 \Delta x^2 + \frac{(j-l)^4}{12} \Gamma_4 \Delta x^4 + \frac{(j-l)^6}{360} \Gamma_6 \Delta x^6 + \mathcal{O}(\Delta x^5).$$

Der Erwartungswert des Kommutators von  $\hat{T}$  und  $\hat{T}^\dagger$  verschwindet, falls  $\phi_0 = \phi_{N-1} = 0$ , denn

$$\langle [\hat{T}, \hat{T}^\dagger] \rangle = \sum_{k=1}^{N-2} \phi_k^* \left( \langle k+1 | \hat{T}^\dagger | \phi \rangle - \langle k-1 | \hat{T} | \phi \rangle \right) = \sum_{k=1}^{N-2} \phi_k^* (\langle k | \phi \rangle - \langle k | \phi \rangle) = 0.$$

Somit gilt auch  $\langle (\hat{T}^\dagger)^l \hat{T}^j \rangle = \langle \hat{T}^j (\hat{T}^\dagger)^l \rangle$ .

## 2.5 Diskreter Ortsableitungsoperator

Sei  $\hat{D}$  der Operator, der einen diskreten Zustand  $|\phi\rangle$  auf denjenigen diskreten Zustand abbildet, der durch Ableitung des zugehörigen kontinuierlichen Zustands entsteht, das heißt die Komponenten  $(\hat{D}\phi)_k = \langle k | \hat{D} | \phi \rangle$  des transformierten Zustands  $\hat{D}|\phi\rangle$  seien definiert durch

$$(\hat{D}\phi)_k := \frac{d\phi_k}{dx_k} = \frac{d}{dx_k} (C \cdot \psi(x_k)) = C \cdot \psi'(x_k).$$

Wenn  $\hat{d}$  der kontinuierliche Ableitungsoperator ist, also  $\langle x | \hat{d} | \psi \rangle = \psi'(x)$  gilt, dann folgt:

$$\langle k | \hat{D} | \phi \rangle = C \langle x_k | \hat{d} | \psi \rangle.$$

Der Operator selbst kann dargestellt werden durch seine Matrixkomponenten:

$$\hat{D} = \sum_{k,l=0}^{N-1} |k\rangle \langle k | \hat{D} | l \rangle \langle l| = C \cdot \sum_{k,l=0}^{N-1} |k\rangle \langle x_k | \hat{d} | x_l \rangle \langle l|.$$

In der numerischen Simulation ist die Ableitung der Wellenfunktion  $\psi'(x)$  unbekannt, weshalb der Operator  $\hat{D}$  approximiert werden muss. Eine Approximation<sup>3</sup>  $A$  besitzt einen zugehörigen Approximationsoperator  $\hat{D}_A$  und einen Fehleroperator  $\Delta \hat{D}_A$ , für die gilt

$$\hat{D}_A + \Delta \hat{D}_A = \hat{D}.$$

Der Fehleroperator ist allgemein nicht bekannt und kann nur abgeschätzt werden. Relevant ist hier vor allem die Konvergenzordnung  $\alpha_A$ , welche beschreibt wie schnell der Fehler für kleinere Schrittweiten  $\Delta x$  gegen 0 konvergiert:

$$\langle \Delta \hat{D}_A \rangle = \mathcal{O}(\Delta x^{\alpha_A}).$$

Die Approximationsoperatoren lassen sich aus den bekannten Methoden zur numerischen Differentiation einer Funktion  $\psi(x)$  herleiten. Im Folgenden sind vier Methoden aufgelistet, die im Rahmen

<sup>3</sup>Das Symbol  $A$  dient hier als Platzhalter für die Approximationsbezeichnungen V, R, Z und 5P, welche unten eingeführt werden.

dieser Arbeit untersucht werden:

$$\begin{aligned}
\textbf{Vorwärts-Differenzenquotient (V): } \psi'(x) &= \frac{\psi(x + \Delta x) - \psi(x)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \\
\textbf{Rückwärts-Differenzenquotient (R): } \psi'(x) &= \frac{\psi(x) - \psi(x - \Delta x)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \\
\textbf{zentraler Differenzenquotient (Z): } \psi'(x) &= \frac{\psi(x + \Delta x) - \psi(x - \Delta x)}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \\
\textbf{Fünfpunktmethode (5P): } \psi'(x) &= \frac{1}{12\Delta x} \left( -\psi(x + 2\Delta x) + 8\psi(x + \Delta x) \right. \\
&\quad \left. - 8\psi(x - \Delta x) + \psi(x - 2\Delta x) \right) + \mathcal{O}(\Delta x^4).
\end{aligned}$$

Anhand dieser Formeln werden vier Approximationsoperatoren eingeführt:

$$\begin{aligned}
\hat{D}_V &:= \frac{\hat{T} - 1}{\Delta x}, & \hat{D}_R &:= \frac{1 - \hat{T}^\dagger}{\Delta x}, & \hat{D}_Z &:= \frac{\hat{T} - \hat{T}^\dagger}{2\Delta x}, \\
\hat{D}_{5P} &:= \frac{-\hat{T}^2 + 8\hat{T} - 8\hat{T}^\dagger + (\hat{T}^\dagger)^2}{12\Delta x}.
\end{aligned}$$

Die Konvergenzordnungen dieser Approximationen sind

$$\alpha_V = \alpha_R = 1, \quad \alpha_Z = 2, \quad \alpha_{5P} = 4.$$

Am Rand des diskretisierten Raums (also für  $k = N - 1$  und  $k = 0$ ) führen die oben verwendeten Translationsoperatoren  $\hat{T}$  bzw.  $\hat{T}^\dagger$  keine korrekte Translation der Wellenfunktion mehr durch, weshalb zu erwarten ist, dass sich die Erwartungswerte  $\langle k | \Delta \hat{D}_A | k \rangle$  hier deutlich anders verhalten als im restlichen Bereich. Diese Erwartungswerte können von den oben angegebenen Konvergenzordnungen wahrscheinlich nicht mehr beschrieben werden. Für  $\hat{D}_{5P}$  sind davon auch die Punkte  $k = N - 2$  und  $k = 1$  betroffen, da die Translationsoperatoren hier doppelt angewendet werden. Um dieses Problem zu umgehen, kann man für die untersuchten Zustände  $\phi_k = 0$  für  $k \in \{0, 1, N - 2, N - 1\}$  verlangen.

## 2.6 Diskreter Impulsoperator und kinetischer Hamiltonoperator

Angelehnt an die Ortsdarstellung des kontinuierlichen Impulsoperators  $\hat{p} = -i\hbar\partial/\partial x$  lässt sich der exakte diskrete Impulsoperator  $\hat{P}$  unter Verwendung der oben eingeführten Ortsableitung  $\hat{D}$  definieren:

$$\hat{P} := -i\hbar\hat{D}.$$

Die Impulsoperatoren, die aus den Approximationen der Ortsableitung folgen, und die zugehörigen Fehleroperatoren seien analog gegeben durch

$$\hat{P}_A := -i\hbar\hat{D}_A, \quad \Delta\hat{P}_A := \hat{P} - \hat{P}_A = -i\hbar\Delta\hat{D}_A.$$

Für den kinetischen Anteil  $\hat{H}_0$  des Hamiltonoperators ist lediglich das Quadrat des Impulsoperators  $\hat{P}^2$  relevant. Um eine hermitesche Approximation des Hamiltonoperators zu erhalten, gibt es unter anderem folgende Möglichkeiten:

$$\hat{H}_0^{\text{VR}} := \frac{\hat{P}_V \hat{P}_R}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \hat{D}_V \hat{D}_R, \quad \hat{H}_0^Z := \frac{\hat{P}_Z^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \hat{D}_Z^2, \quad \hat{H}_0^{5P} := \frac{\hat{P}_{5P}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \hat{D}_{5P}^2.$$

Dass diese Hamiltonoperatoren hermitesch sind, ist einfach zu zeigen. Dazu stellt man zunächst fest, dass

$$\hat{P}_V^\dagger = \left( -i\hbar \frac{\hat{T} - 1}{\Delta x} \right)^\dagger = i\hbar \frac{\hat{T}^\dagger - 1}{\Delta x} = -\hat{P}_R$$

und analog auch  $\hat{P}_R^\dagger = -\hat{P}_V$ . Damit folgt

$$\left( \hat{H}_0^{\text{VR}} \right)^\dagger = \frac{\hat{P}_R^\dagger \hat{P}_V^\dagger}{2m} = \frac{(-\hat{P}_V)(-\hat{P}_R)}{2m} = \hat{H}_0^{\text{VR}}.$$

Zudem gilt  $\hat{P}_Z^\dagger = -\hat{P}_Z$  und  $\hat{P}_{5P}^\dagger = -\hat{P}_{5P}$ , woraus direkt auch die Hermizität von  $\hat{H}_0^Z$  bzw.  $\hat{H}_0^{5P}$  folgt.

## 2.7 Diskreter Potenzialoperator

Das Potenzial des betrachteten Systems sei gegeben durch eine ortsabhängige Funktion  $V(x)$ . Die Potenzialwerte an den diskreten Ortspunkten  $x_k$  sind dann gegeben durch  $V_k := V(x_k)$ . Daraus lässt sich ein Potenzialoperator  $\hat{V}$  bilden, der folgende Eigenwertgleichung für alle Basiszustände  $|k\rangle$  erfüllt:

$$\hat{V} |k\rangle = V_k |k\rangle.$$

In dieser Arbeit werden anharmonische und harmonische Potenziale folgender Form betrachtet:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{X}^2 + \lambda \cdot \frac{m^2 \omega^3}{4 \hbar} \hat{X}^4. \quad (4)$$

Hierbei ist  $\lambda \in \mathbb{R}$  ein dimensionsloser Parameter, der die Anharmonizität des Potenzials bestimmt, und  $\omega$  die Frequenz des Oszillators. Für  $\lambda = 0$  ist das Potenzial harmonisch.

## 2.8 Diskreter Hamiltonoperator und Energiespektrum

Der exakte Hamiltonoperator in einem Potenzial  $\hat{V}$  sei gegeben durch

$$\hat{H} := \hat{H}_0 + \hat{V} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}$$

und der Hamiltonoperator einer Approximation des kinetischen Hamiltonoperators  $\hat{H}_0^A$  analog durch

$$\hat{H}^A := \hat{H}_0^A + \hat{V}.$$

Die Energien  $E_n$  und  $E_m^A$  und Eigenzustände  $|E_n\rangle, |E_m^A\rangle$  (indiziert durch  $n$  bzw.  $m$ ) des exakten bzw. approximierten Systems sind also gegeben durch folgende Eigenwertgleichungen:

$$\hat{H} |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle, \quad \hat{H}^A |E_m^A\rangle = E_m^A |E_m^A\rangle.$$

## 2.9 Kohärente Zustände

Kohärente Zustände sind Eigenzustände der Leiteroperatoren des harmonischen Oszillators. Die Wellenfunktion eines kohärenten Zustands ist eine Gaußkurve der Form [1]

$$\psi(x) = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left( \frac{i}{\hbar} p x - \frac{m\omega}{2\hbar} (x - q)^2 \right), \quad (5)$$

wobei  $\omega$  die Frequenz des Oszillators ist und  $m$  die Masse des sich darin befindenden Teilchens, während die Parameter  $q$  und  $p$  die mittlere Position bzw. den mittleren Impuls des Teilchens beschreiben und frei wählbar sind. Der Ortsmittelwert  $q$  eines kohärenten Zustands oszilliert im harmonischen Oszillatorpotenzial um das Zentrum, während die räumliche Ausdehnung unverändert bleibt. Einige beispielhafte Wellenfunktionen sind in Abb. 2 abgebildet. Wie man dort erkennen kann, wird die Wellenfunktion für größere  $\omega$  breiter und hat somit auch höhere Werte bei den Randpunkten  $x = \pm d$  (im diskreten  $k = 0, N - 1$ ). Wie oben erklärt wurde, ist dies aufgrund des Sprungs der diskreten Ortsableitung nicht erwünscht, weshalb im Folgenden stets hinreichend schmale Wellenfunktionen mit  $\omega = 100$  verwendet werden. Falls nicht anders gekennzeichnet, wird zudem immer  $m = \hbar = 1$  gesetzt.

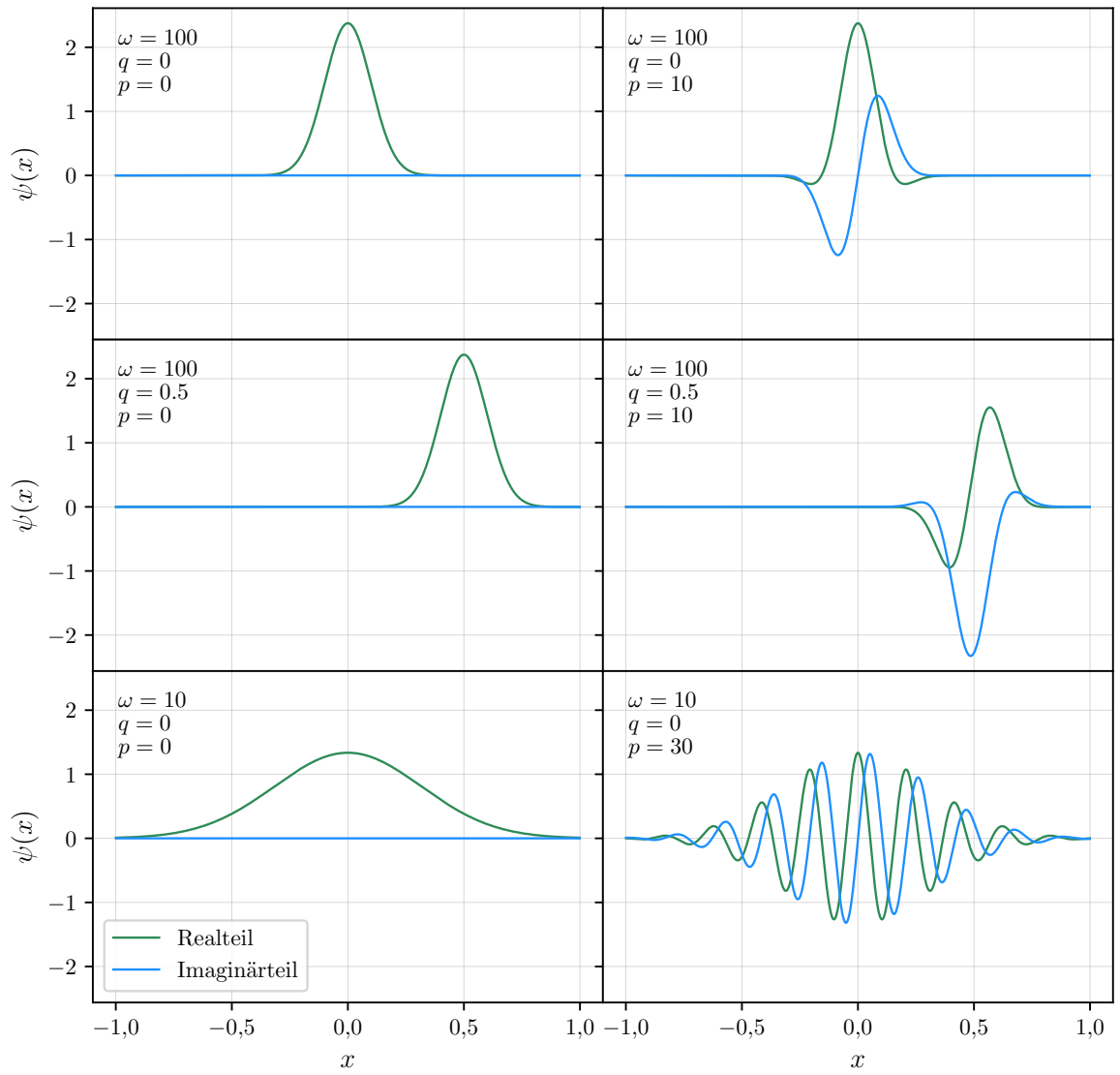


Abbildung 2: Wellenfunktionen einiger kohärenter Zustände für  $m = \hbar = d = 1$ .

### 3 Vertauschungsrelation von Ort und Impuls

Der erste Teil dieser Arbeit befasst sich mit der Untersuchung der Vertauschungsrelation des diskreten Orts- und Impulsoperators. Dabei soll insbesondere die Abweichung von der Vertauschungsrelation der kontinuierlichen Operatoren betrachtet werden.

#### 3.1 Fehleroperatoren der diskreten Vertauschungsrelation

Die Abweichung des approximierten Kommutators  $[\hat{X}, \hat{P}_A]$  vom kontinuierlichen Kommutator  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$  kann durch einen Fehleroperator  $\hat{\delta}_A$  quantifiziert werden:

$$\hat{\delta}_A := \frac{1}{i\hbar} ([\hat{x}, \hat{p}] - [\hat{X}, \hat{P}_A]) = 1 - \frac{1}{i\hbar} [\hat{X}, \hat{P}_A].$$

Der Vorfaktor  $1/i\hbar$  sorgt für reelle, dimensionslose Erwartungswerte. Mit  $\hat{P}_A = -i\hbar\hat{D}_A$  kann man den Fehleroperator schreiben als

$$\hat{\delta}_A = 1 + [\hat{X}, \hat{D}_A].$$

Die Fehleroperatoren der hier betrachteten Approximationen sind somit gegeben durch

$$\begin{aligned}\hat{\delta}_V &= 1 + \frac{[\hat{X}, \hat{T}]}{\Delta x}, & \hat{\delta}_R &= 1 - \frac{[\hat{X}, \hat{T}^\dagger]}{\Delta x}, & \hat{\delta}_Z &= 1 + \frac{[\hat{X}, \hat{T}] - [\hat{X}, \hat{T}^\dagger]}{2\Delta x}, \\ \hat{\delta}_{5P} &= 1 + \frac{-[\hat{X}, \hat{T}^2] + 8[\hat{X}, \hat{T}] - 8[\hat{X}, \hat{T}^\dagger] + [\hat{X}, (\hat{T}^\dagger)^2]}{12\Delta x}.\end{aligned}$$

Die Kommutatoren von  $\hat{X}$  und  $\hat{T}$ ,  $\hat{T}^\dagger$ ,  $\hat{T}^2$  sowie  $(\hat{T}^\dagger)^2$  sind aufgrund des Verhaltens der Translationsoperatoren am Rand (für  $k = 0, 1, N-2, N-1$ ) nicht trivial. Deshalb werden im Folgenden ausschließlich die Erwartungswerte der Kommutatoren in einem Zustand  $|\phi\rangle$  mit  $\phi_0 = \phi_1 = \phi_{N-2} = \phi_{N-1} = 0$  betrachtet. In diesem Fall erhält man

$$\begin{aligned}\langle [\hat{X}, \hat{T}] \rangle &= -\Delta x \langle \hat{T} \rangle, & \langle [\hat{X}, \hat{T}^\dagger] \rangle &= \Delta x \langle \hat{T}^\dagger \rangle, \\ \langle [\hat{X}, \hat{T}^2] \rangle &= -2\Delta x \langle \hat{T}^2 \rangle, & \langle [\hat{X}, (\hat{T}^\dagger)^2] \rangle &= 2\Delta x \langle (\hat{T}^\dagger)^2 \rangle.\end{aligned}$$

Für die Erwartungswerte der Fehleroperatoren folgt also

$$\begin{aligned}\langle \hat{\delta}_V \rangle &= 1 - \langle \hat{T} \rangle, & \langle \hat{\delta}_R \rangle &= 1 - \langle \hat{T}^\dagger \rangle, & \langle \hat{\delta}_Z \rangle &= 1 - \frac{\langle \hat{T} \rangle + \langle \hat{T}^\dagger \rangle}{2}, \\ \langle \hat{\delta}_{5P} \rangle &= 1 + \frac{\langle \hat{T}^2 \rangle + \langle (\hat{T}^\dagger)^2 \rangle - 4(\langle \hat{T} \rangle + \langle \hat{T}^\dagger \rangle)}{6}\end{aligned}$$

und mit den Abschätzungen und Relationen aus Abschnitt 2.4.2 erhält man<sup>4</sup>

$$\begin{aligned}\langle \hat{\delta}_V \rangle &= -i\Gamma_1\Delta x - \frac{1}{2}\Gamma_2\Delta x^2 - \frac{1}{6}i\Gamma_3\Delta x^3 - \frac{1}{24}\Gamma_4\Delta x^4 + \mathcal{O}(\Delta x^5), \\ \langle \hat{\delta}_R \rangle &= i\Gamma_1\Delta x - \frac{1}{2}\Gamma_2\Delta x^2 + \frac{1}{6}i\Gamma_3\Delta x^3 - \frac{1}{24}\Gamma_4\Delta x^4 + \mathcal{O}(\Delta x^5), \\ \langle \hat{\delta}_Z \rangle &= -\frac{1}{2}\Gamma_2\Delta x^2 - \frac{1}{24}\Gamma_4\Delta x^4 + \mathcal{O}(\Delta x^5), \\ \langle \hat{\delta}_{5P} \rangle &= \Gamma_4\Delta x^4 + \mathcal{O}(\Delta x^5).\end{aligned}$$

Die Terme nullter Ordnung in  $\Delta x$  verschwinden also alle, die Terme erster und dritter Ordnung sind rein imaginär, während die Terme zweiter und vierter Ordnung rein reell sind. Die Z-Methode hat keinen Beitrag erster Ordnung und die 5P-Methode keinen Beitrag unterhalb der vierten Ordnung. Im nächsten Abschnitt werden diese Ergebnisse durch eine numerische Analyse verifiziert. Dabei wird eine hinreichend schmale kohärente Wellenfunktion verwendet, sodass die Annahme, dass die ersten sechs Ableitungen von  $\psi(x)$  außerhalb von  $(x_2, x_{N-3})$  verschwinden<sup>5</sup>, in hinreichend guter Näherung zutrifft.

<sup>4</sup>Hier reichen die Abschätzungen bis zur vierten Ordnung aus. Die höheren Ordnungen werden erst beim Energiespektrum relevant.

<sup>5</sup>Hier ist das Intervall  $(x_2, x_{N-3})$  entscheidend, da der Translationsoperator und seine hermitesche Konjugation maximal zweifach angewendet wird.

## 3.2 Erwartungswerte des Fehleroperators

Die Erwartungswerte des Fehleroperators können numerisch bestimmt werden, indem der Operator als Matrix bzw. 2D-Array implementiert wird und auf einen kohärenten Zustand angewendet wird, der numerisch als Vektor bzw. 1D-Array dargestellt wird. Die Berechnungen werden hier in Python mit dem Paket `numpy` durchgeführt.

### 3.2.1 Bestimmung der Konvergenzordnungen für verschiedene Wellenfunktionen

Wie an der Wellenfunktion eines kohärenten Zustands (5) zu erkennen ist, bestimmt der Parameter  $p$  den imaginären Anteil. Für  $p = 0$  ist die Wellenfunktion rein reell. Hier erwartet man, dass bei den Erwartungswerten der Fehleroperatoren  $\hat{\delta}_V$  und  $\hat{\delta}_R$  die Beiträge erster Ordnung in  $\Delta x$  verschwinden, also  $\Gamma_1 = 0$  ist. Dies ist der Fall, da für den Imaginärteil des Erwartungswerts gilt

$$\text{Im} \langle \hat{\delta}_A \rangle = \sum_{k=0}^{N-1} \text{Im} \left( \phi_k^* (\hat{\delta}_A \phi)_k \right).$$

Bei rein reellen Wellenfunktionen gilt auch  $\phi_k \in \mathbb{R}$  für alle  $k$  und somit

$$\text{Im} \langle \hat{\delta}_A \rangle = \sum_{k=0}^{N-1} \phi_k \text{Im} \left( (\hat{\delta}_A \phi)_k \right).$$

An den Definitionen von  $\hat{\delta}_V$  und  $\hat{\delta}_R$  erkennt man, dass die Operatoren den Imaginärteil der Zustandskomponenten unverändert lassen. Wegen  $\text{Im} \phi_k = 0$  folgt also auch  $\text{Im} \langle \hat{\delta}_V \rangle = \text{Im} \langle \hat{\delta}_R \rangle = 0$ . Vergrößert man den Parameter  $p$ , so sollten sich die imaginären Beiträge, also in diesem Fall die Beiträge erster Ordnung in  $\Delta x$ , vergrößern.

Zunächst werden die Konvergenzordnungen der verschiedenen Approximationsmethoden für einen rein reellen kohärenten Zustand mit  $p = q = 0$  und  $\omega = 100$  bestimmt. Dazu werden die Absolutwerte der berechneten Erwartungswerte der Fehleroperatoren  $\langle \hat{\delta}_A \rangle$  doppellogarithmisch gegen die Schrittweite  $\Delta x$  aufgetragen. Das Ergebnis ist in Abb. 3 zu sehen. Man erkennt für hinreichend kleine  $\Delta x$  einen linearen Verlauf. Rein qualitativ fällt auf, dass die Erwartungswerte  $\langle \hat{\delta}_V \rangle$  und  $\langle \hat{\delta}_R \rangle$  mit der gleichen Geschwindigkeit konvergieren wie  $\langle \hat{\delta}_Z \rangle$ , während  $\langle \hat{\delta}_{5P} \rangle$  deutlich schneller konvergiert. Durch Geradenfits in der markierten Region kann die Steigung  $\alpha_A$  für alle Approximationen  $A$  bestimmt werden. In dieser linearen Region der doppellogarithmischen Darstellung gilt

$$\langle \hat{\delta}_A \rangle \propto \Delta x^{\alpha_A},$$

sodass  $\alpha_A$  die Konvergenzordnung des Erwartungswerts angibt. Für  $p = 0$  ergeben die Geradenfits

$$\alpha_R = \alpha_V = \alpha_Z = 1,9984 \pm 0,0003, \quad \alpha_{5P} = 3,9946 \pm 0,0008,$$

wobei  $\chi^2/dof < 10^{-5}$  ( $\chi^2$ -Wert normiert durch die Anzahl der Freiheitsgrade  $dof$ ) und die angegebenen Ungenauigkeiten aus der Kovarianz der Fits bestimmt wurden. Für alle Approximationsmethoden wurden somit die erwarteten Konvergenzordnungen mit guter Genauigkeit bestimmt. Die Konvergenzordnungen der V- und R-Methoden sind wie erwartet 2, da der Beitrag erster Ordnung aufgrund der rein reellen Wellenfunktion verschwindet. Aufgrund der Wahl einer hinreichend schmalen Wellenfunktion, also einem hinreichend großen  $\omega$ , liegt hier keine Abhängigkeit von Randbedingung  $R$  vor.

Vergrößert man nun  $p$  auf 10, so erhält man den Verlauf in Abb. 4. Hier erkennt man deutlich, dass die Verläufe der V- und R-Methoden deutlich von dem der Z-Methode getrennt sind. Numerisch wurden die Konvergenzordnungen hier bestimmt zu

$$\alpha_V = \alpha_R = 0,9983 \pm 0,0003, \quad \alpha_Z = 1,9966 \pm 0,0005, \quad \alpha_{5P} = 3,9902 \pm 0,0013,$$

wobei die Fits auch hier mit  $\chi^2/dof < 10^{-4}$  als gut zu bewerten sind. Wie erwartet wird der Beitrag erster Ordnung der V- und R-Methoden für einen größeren  $p$ -Wert relevant, sodass dieser hier dominiert.

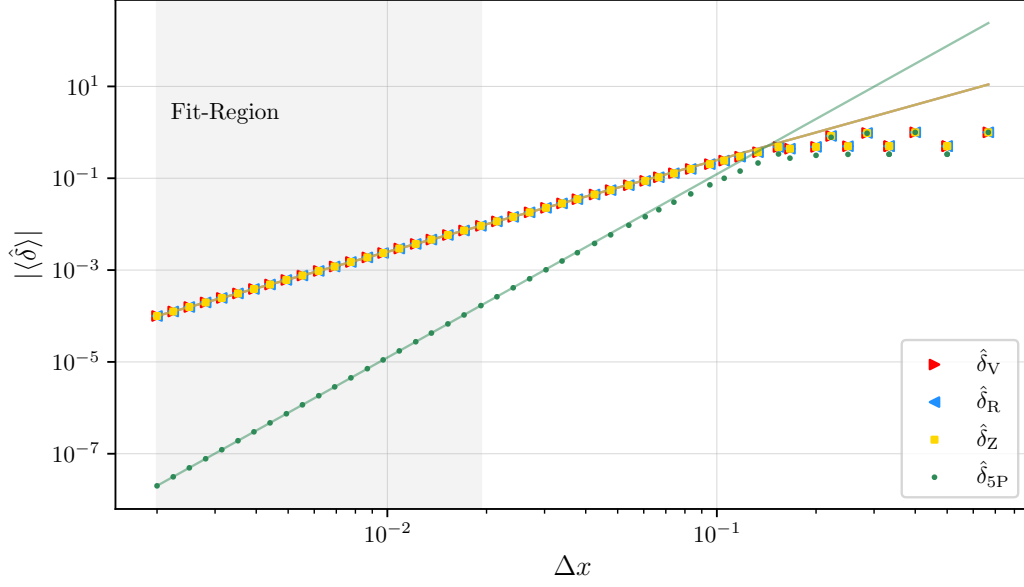


Abbildung 3:  $\Delta x$ -Abhängigkeit von  $\langle \hat{\delta}_A \rangle$  für die vier verschiedenen Ableitungsapproximationen bei einem kohärenten Zustand mit  $q = p = 0$ ,  $\omega = 100$ .

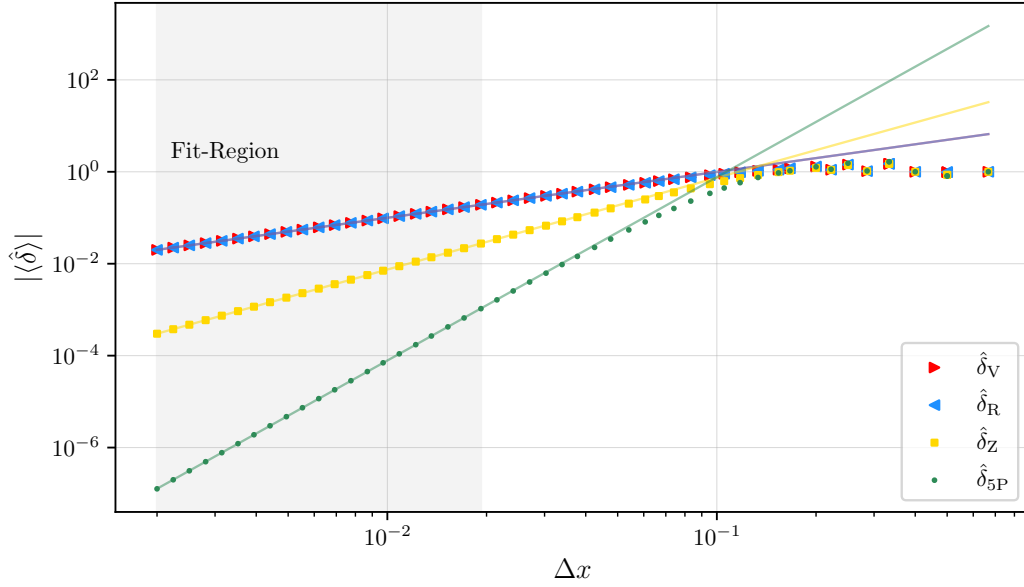


Abbildung 4:  $\Delta x$ -Abhängigkeit von  $\langle \hat{\delta}_A \rangle$  für die vier verschiedenen Ableitungsapproximationen bei einem kohärenten Zustand mit  $q = 0$ ,  $p = 10$ ,  $\omega = 100$ .

### 3.2.2 Untersuchung der $p$ -Abhängigkeit der Konvergenzordnungen

Zur genaueren Untersuchung des Einflusses des  $p$ -Parameters auf die Konvergenzordnungen werden für verschiedene  $p$ -Werte Geradenfits erstellt und die aus den Steigungen bestimmten Konvergenzordnungen dagegen aufgetragen. Man erhält den Verlauf in Abb. 5. Dort ist zu erkennen, dass für  $p < 0,1$  der Beitrag erster Ordnung nahezu verschwindet, im Bereich  $0,1 < p < 1$  größer wird und für  $p > 1$  dominiert. Ein gutes Maß für die Position des Übergangs ist der Impuls  $p$ , bei dem  $\alpha_V = 1,5$ , welcher im Folgenden als Übergangsimpuls  $p_{\text{trans}}$  bezeichnet wird<sup>6</sup>. Um einen hinreichend genauen Wert für  $p_{\text{trans}}$  zu bestimmen, werden die Datenpunkte linear interpoliert und der erste Datenpunkt mit  $\alpha_V \geq 1,5$  gesucht. Die Ungenauigkeit von  $\hat{p}_{\text{trans}}$  wird aus dem Abstand des interpolierten Datenpunkts

<sup>6</sup>Zur Messung könnte genauso gut  $\alpha_R$  verwendet werden, da der Verlauf der beiden Methoden exakt gleich ist.

zum nächsten tatsächlichen Datenpunkt abgeschätzt.

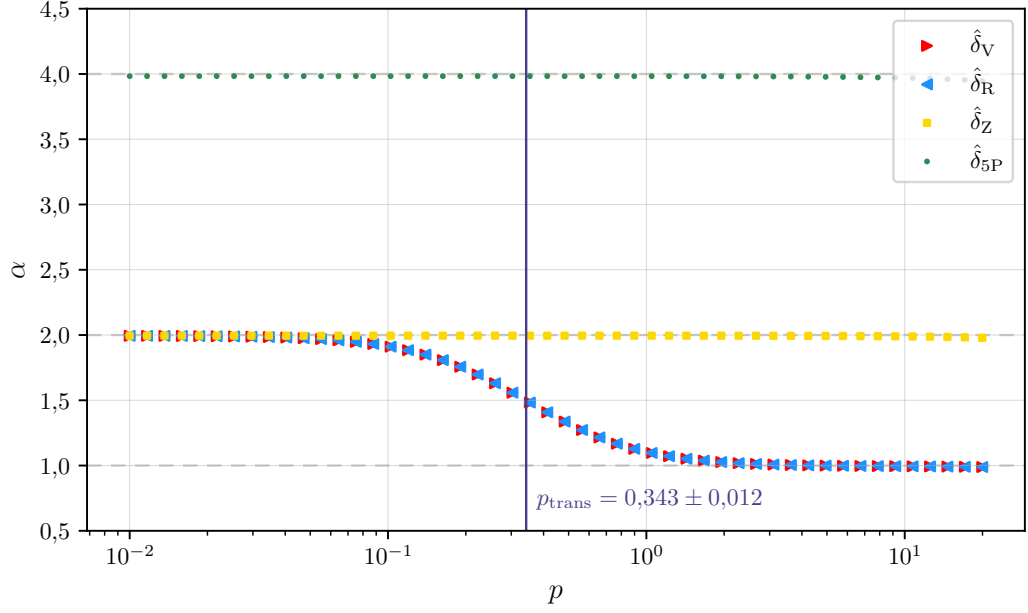


Abbildung 5:  $p$ -Abhängigkeit der Konvergenzordnungen  $\alpha_A$  für die vier verschiedenen Ableitungsapproximationen für  $\omega = 100$  (Ungenauigkeiten von  $\alpha$  kleiner als dargestellte Punkte).

Bei Betrachtung der Wellenfunktion eines kohärenten Zustands (5) fällt auf, dass der Realteil des Exponenten  $m\omega/2\hbar \cdot (x - q)^2$  durch den hohen  $\omega$ -Wert von 100 für kleine  $p$ -Werte deutlich größer ist, als der Imaginärteil  $ipx/\hbar$ . Die Position des Übergangs sollte somit linear von  $\omega$  abhängen. Um diese Überlegung zu überprüfen, wird  $p_{\text{trans}}$  für verschiedene  $\omega$  bestimmt. In Abb. 6 sind die bestimmten Datenpunkte abgebildet. Man erkennt in der Tat eine lineare Abhängigkeit.

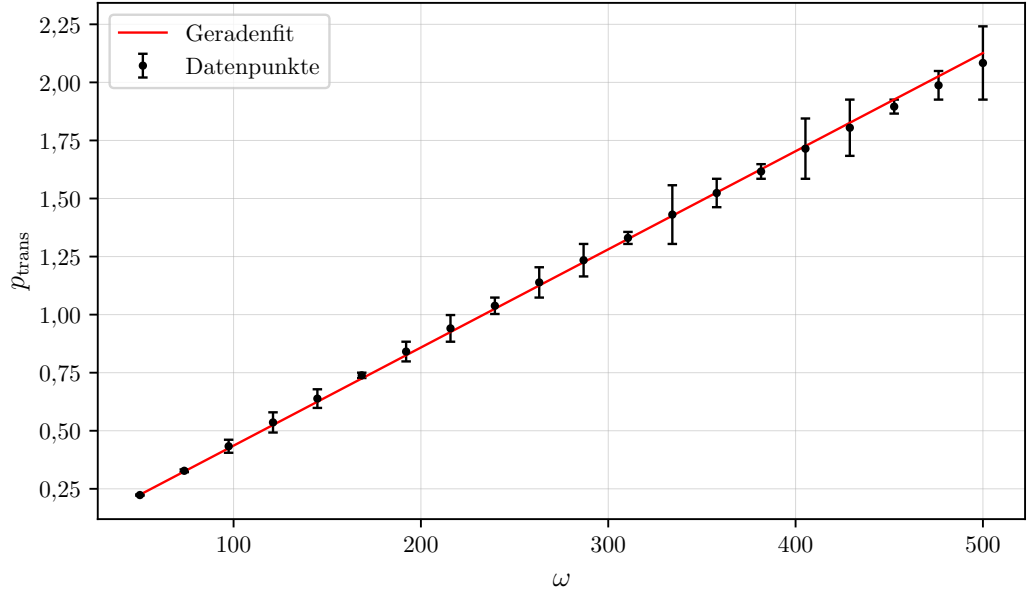


Abbildung 6:  $\omega$ -Abhängigkeit des Übergangsimpulses  $p_{\text{trans}}$  mit Geradenfit ( $\chi^2/\text{dof} = 5 \cdot 10^{-4}$ ).

### 3.2.3 Verhalten bei unterschiedlichen Randbedingungen

Bis jetzt hatte die Wahl der Randbedingung  $R$  keinen relevanten Einfluss auf die Ergebnisse. Wird  $\omega$  jedoch kleiner gewählt, sodass die Wellenfunktion breit ist und einen nicht verschwindenden Wert



am Rand bei  $x = \pm d$  aufweist, dann hängt  $\log |\langle \hat{\delta}_A \rangle|$  nicht mehr linear von  $\log \Delta x$  ab. Das Ergebnis für  $\omega = 2$ ,  $p = 10$ ,  $R = 1$  ist in Abb. 7 zu sehen. Man erkennt, dass die Erwartungswerte für kleinere  $\Delta x$  nahezu konstant werden, das heißt eine Verbesserung der Ortsauflösung trägt nicht mehr zu einer Verbesserung der Genauigkeit bei. In diesem Fall hat die Randbedingung  $R$  einen Einfluss auf den Verlauf, wie beim Vergleich mit Abb. 8, wo  $R = 0$  verwendet wurde, zu sehen ist. Für  $R = 0$  verhalten sich die Erwartungswerte in der untersuchten Region für die V- und R-Methoden auch bei diesem niedrigen  $\omega$ -Wert noch wie erwartet nach Konvergenzordnung  $0,9990 \pm 0,0002 \approx 1$ . Die Konvergenzordnung der Z-Methode liegt hier leicht abgeschwächt bei  $1,721 \pm 0,014$ , während bei der 5P-Methode ein Knick zu beobachten ist, der die Konvergenzordnung für  $\Delta x < 0,02$  auf  $1,059 \pm 0,010$  senkt. Anders als bei der periodischen Randbedingung tritt hier jedoch weiterhin eine Verbesserung der Genauigkeit auf. Für breite Wellenfunktionen bietet sich die Randbedingung  $R = 0$  scheinbar also besser an.

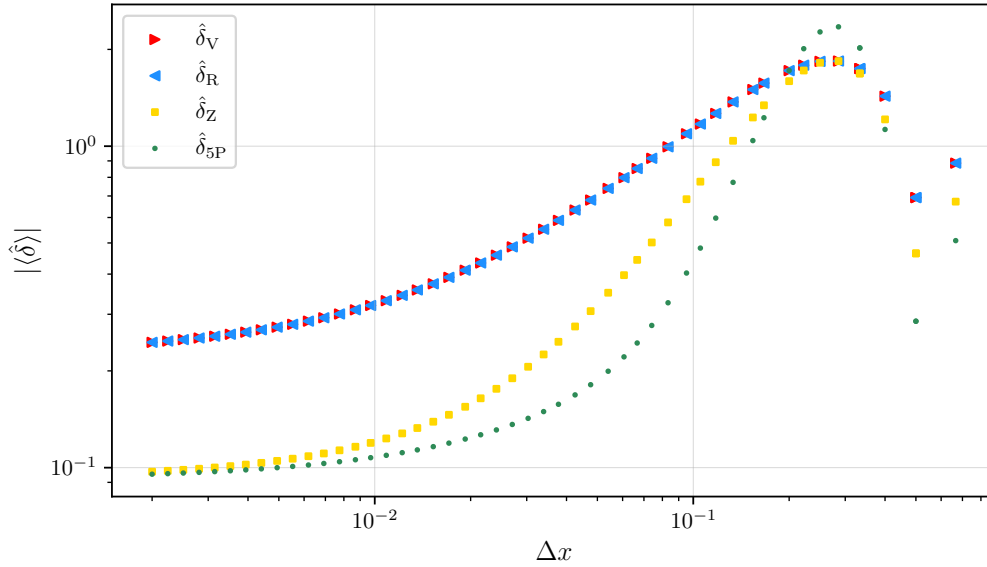


Abbildung 7:  $\Delta x$ -Abhängigkeit von  $\langle \hat{\delta}_A \rangle$  für die vier verschiedenen Ableitungsapproximationen bei einem kohärenten Zustand mit  $q = 0$ ,  $p = 10$ ,  $\omega = 2$ ,  $R = 1$ .

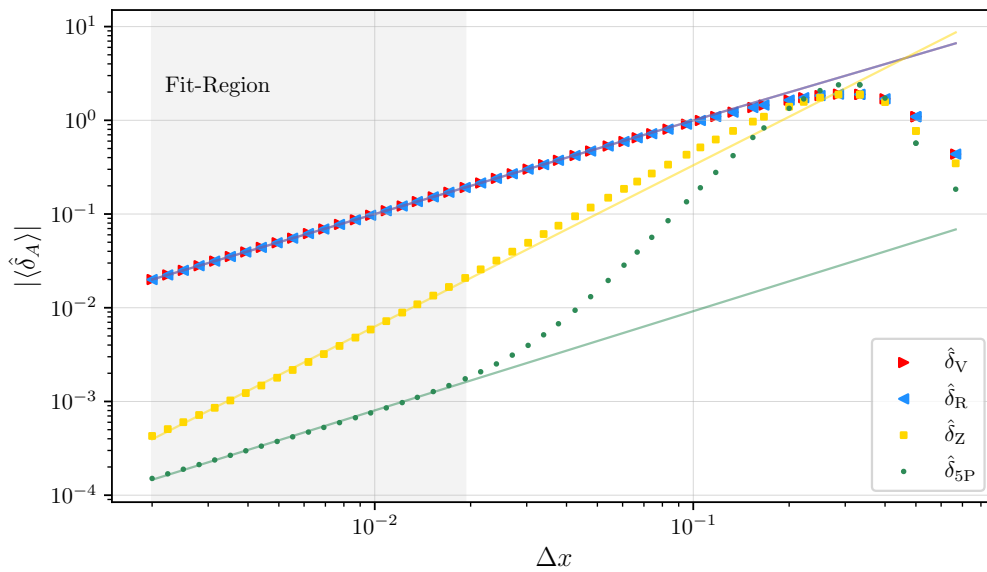


Abbildung 8:  $\Delta x$ -Abhängigkeit von  $\langle \hat{\delta}_A \rangle$  für die vier verschiedenen Ableitungsapproximationen bei einem kohärenten Zustand mit  $q = 0$ ,  $p = 10$ ,  $\omega = 2$ ,  $R = 0$ .

Trägt man die Erwartungswerte der Fehleroperatoren für beide Randbedingungen gegen  $\omega$  auf, sieht man nochmals deutlicher, dass die Randbedingung  $R = 0$  für kleine  $\omega$  bessere Ergebnisse liefert, als  $R = 1$ . Wie in Abb. 9 zu sehen ist, liegt der Verlauf für  $R = 0$  stets bei höheren Konvergenzordnungen als für  $R = 1$  und fällt erst bei kleineren  $\omega$ -Werten ab. Interessant sind hier auch die Konvergenzordnungen  $\alpha_{A,0}$ , gegen welche die Approximationen für kleiner werdende  $\omega$  konvergieren (im Plot durch gestrichelte Linien dargestellt). Für  $R = 0$  findet man

$$\alpha_{V,0} = \alpha_{R,0} = 0,993 \pm 0,001, \quad \alpha_{Z,0} = 1,646 \pm 0,005, \quad \alpha_{5P,0} = 1,147 \pm 0,007$$

und für  $R = 1$

$$\alpha_{V,0} = \alpha_{R,0} = 0,139 \pm 0,003, \quad \alpha_{Z,0} = 0,317 \pm 0,005, \quad \alpha_{5P,0} = 0,225 \pm 0,004.$$

Es fällt auf, dass sich die Z-Methode bei einer höheren Konvergenzordnung einpendelt als die 5P-Methode und somit die bessere Genauigkeit bei kleinen Oszillatorfrequenzen liefert, sowohl für  $R = 0$  als auch für  $R = 1$ . Auch auffällig ist, dass die Konvergenzordnung der V- und R-Methoden bei  $R = 0$  im abgebildeten Bereich keinerlei Abhängigkeit von  $\omega$  aufweist. Es konnte sogar festgestellt werden, dass sie auch für noch deutlich kleinere  $\omega$ -Werte (geprüft bis  $\omega = 10^{-16}$ ) nicht signifikant abnimmt.

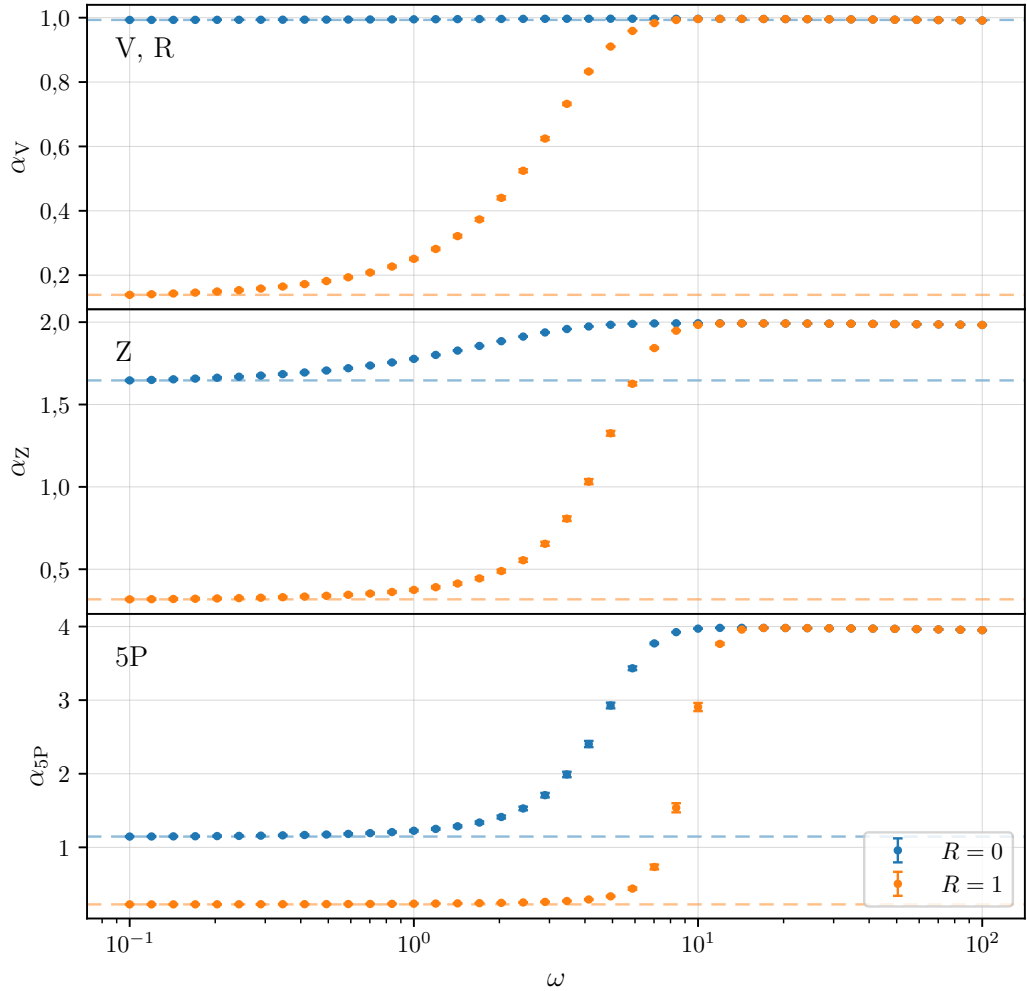


Abbildung 9:  $\omega$ -Abhängigkeit von  $\alpha_A$  für die vier verschiedenen Ableitungsapproximationen bei einem kohärenten Zustand mit  $q = 0$ ,  $p = 10$  und verschiedenen Randbedingungen.

### 3.3 Spektrum des Fehleroperators

Ein anderes Maß für die Größe des Fehleroperators  $\hat{\delta}_A$  sind seine Eigenwerte. Die Eigenwertgleichung lautet

$$\hat{\delta}_A |\delta_{A,n}\rangle = \delta_{A,n} |\delta_{A,n}\rangle,$$

wobei  $\delta_{A,n}$  die Eigenwerte und  $|\delta_{A,n}\rangle$  die Eigenzustände sind. Unter der Annahme, dass jeder Eigenwert einen separaten Index  $n$  besitzt, also entartete Eigenwerte mehrfach gezählt werden, ist die Wahrscheinlichkeit eines Eigenwerts im Zustand  $|\phi\rangle$  gegeben durch

$$P_{A,n} := |\langle \delta_{A,n} | \phi \rangle|^2.$$

Die Eigenwerte und -zustände können numerisch aus der Matrixdarstellung bestimmt werden. Hier wurde dazu die Funktion `numpy.linalg.eig` verwendet. Die so bestimmten Spektren sind in Abhängigkeit von der Schrittweite  $\Delta x$  für die Randbedingung  $R = 1$  in Abb. 10 zu sehen. Dort sind die Wahrscheinlichkeiten jedes Eigenwerts in einem kohärenten Zustand  $|\phi\rangle$  mit  $q = p = 0$  und  $\omega = 100$  farblich angedeutet, wobei dunklere Striche wahrscheinlichere Eigenwerte kennzeichnen. Man kann qualitativ erkennen, dass sich die Realteile der wahrscheinlichsten Eigenwerte für kleinere  $\Delta x$  bei allen Methoden aus dem positiven Bereich der 0 annähern, also eine Konvergenz des Realteils vorliegt. Wie zu erwarten, ist diese Konvergenz bei der 5P-Methode am schnellsten und bei den V- und R-Methoden am langsamsten. Ein Imaginärteil liegt ausschließlich bei den V- und R-Methoden vor, was daran liegt, dass  $\hat{\delta}_V$  und  $\hat{\delta}_R$  nicht hermitesch sind, wohl aber die anderen beiden Fehleroperatoren. Der Imaginärteil konvergiert ebenso gegen 0, jedoch sowohl aus dem positiven, als auch aus dem negativen Bereich.

Die Spektren für  $R = 0$  sind in Abb. 11 zu sehen. Bei der Z- und 5P-Methode gibt es nur kleine Unterschiede zu den vorigen Spektren, welche bei hinreichend kleinen Schrittweiten nicht mehr ins Gewicht fallen. Anders bei der V- und R-Methode: Hier fällt auf, dass ausschließlich 1 als Eigenwert auftritt. Dies kann leicht nachvollzogen werden. Zunächst stellt man fest, dass für  $R = 0$  gilt

$$\hat{T}|0\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad [\hat{X}, \hat{T}] = -\Delta x \cdot \hat{T} \quad \Rightarrow \quad \hat{\delta}_V = 1 - \hat{T}.$$

Folglich findet man

$$\hat{T}|\delta_{V,n}\rangle = (1 - \hat{\delta}_V)|\delta_{V,n}\rangle = (1 - \delta_{V,n})|\delta_{V,n}\rangle.$$

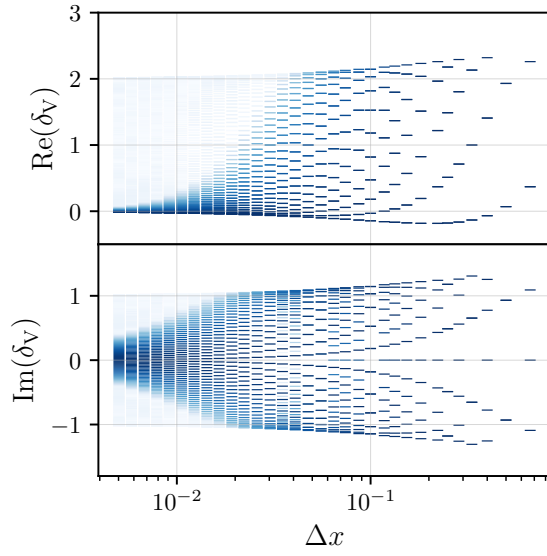
Die Eigenzustände von  $\hat{\delta}_V$  sind also gleichzeitig Eigenzustände von  $\hat{T}$  und die Eigenwerte sind gegeben durch

$$\delta_{V,n} = 1 - T_n,$$

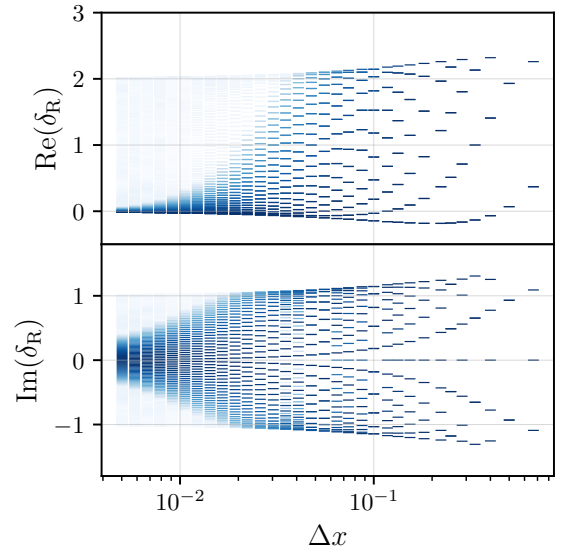
wobei  $T_n$  die Eigenwerte von  $\hat{T}$  sind. Wie in Abschnitt 2.4.1 gezeigt, gilt für  $R = 0$ , dass  $T_n = 0$  und  $|T_n\rangle = |0\rangle$ , sodass folgt

$$\delta_{V,n} = 1, \quad |\delta_{V,n}\rangle = |0\rangle.$$

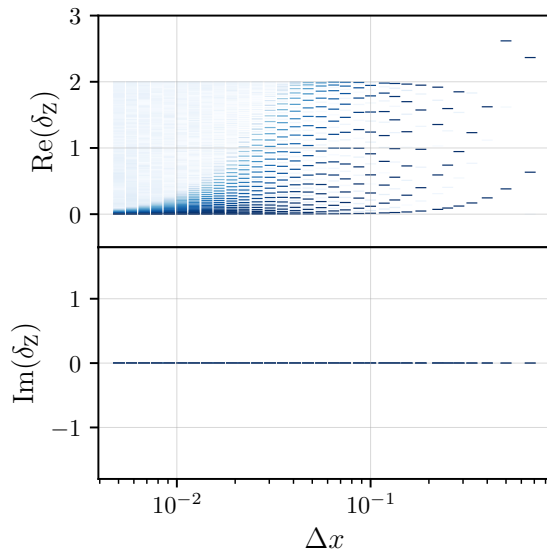
Analog kann dies auch für  $\hat{\delta}_R$  gezeigt werden. Für  $R = 0$  geben die Eigenwerte also keinen Aufschluss über die Konvergenzordnung der V- und R-Methoden.



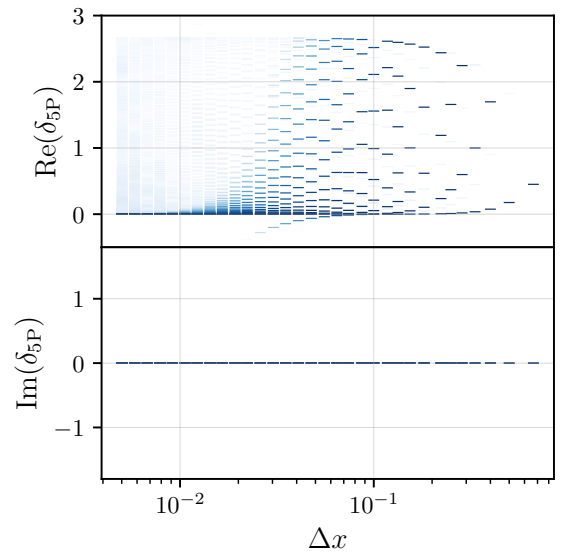
(a) V-Methode



(b) R-Methode

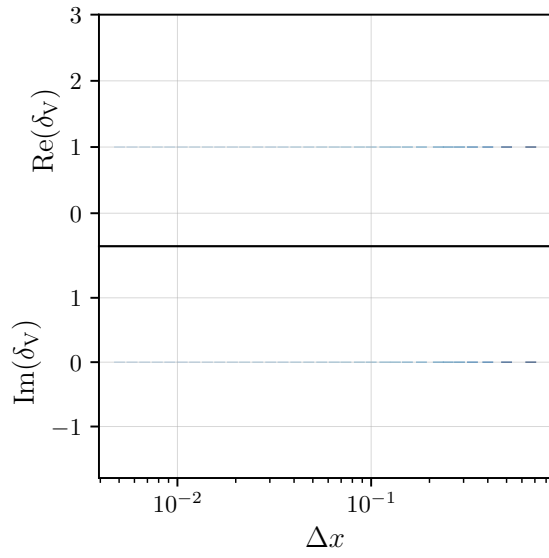


(c) Z-Methode

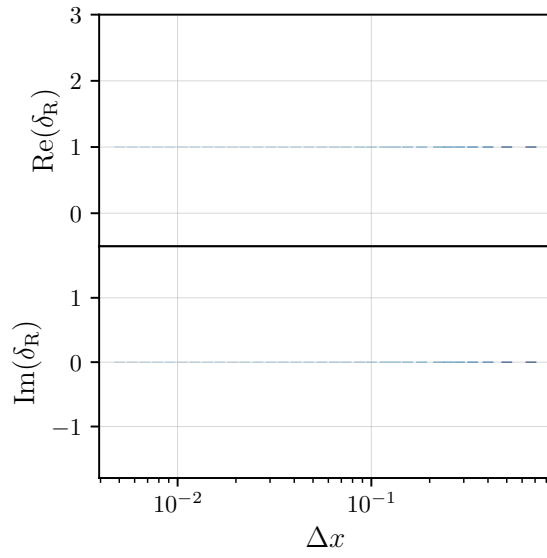


(d) 5P-Methode

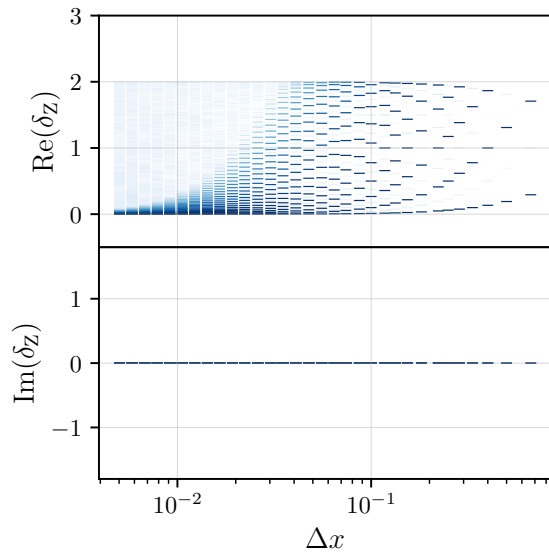
Abbildung 10: Spektren der Fehleroperatoren  $\hat{\delta}_A$  in Abhängigkeit von der Schrittweite  $\Delta x$  für die vier verschiedenen Ableitungsapproximationen bei  $R = 1$ . Wahrscheinlichere Eigenwerte dunkler gekennzeichnet.



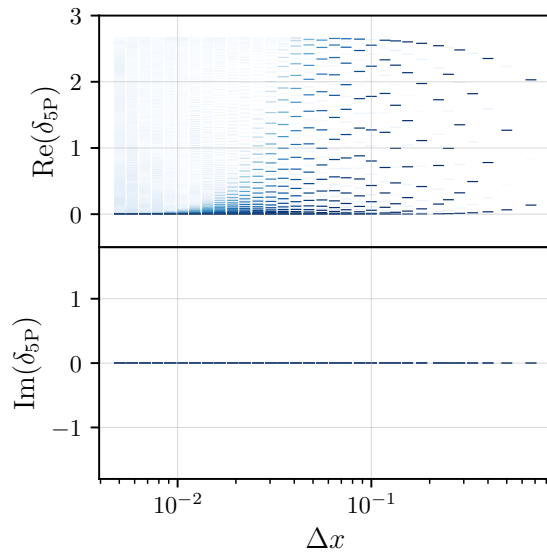
(a) V-Methode



(b) R-Methode



(c) Z-Methode



(d) 5P-Methode

Abbildung 11: Spektren der Fehleroperatoren  $\hat{\delta}_A$  in Abhängigkeit von der Schrittweite  $\Delta x$  für die vier verschiedenen Ableitungsapproximationen bei  $R = 0$ . Wahrscheinlichere Eigenwerte dunkler gekennzeichnet.

## 4 Energiespektrum

Im zweiten Teil dieser Arbeit soll das Energiespektrum des harmonischen und des anharmonischen Oszillators im diskretisierten Hilbertraum untersucht werden. Dazu wird zunächst die analytische Lösung des harmonischen Oszillators im kontinuierlichen Raum zum späteren Vergleich eingeführt, anschließend die Approximationsfehler der Eigenenergien analytisch abgeschätzt und schließlich numerisch die Eigenenergien und Eigenzustände bestimmt.

### 4.1 Analytische Lösung des harmonischen Oszillators

Für das Potenzial des harmonischen Oszillators (4) mit  $\lambda = 0$  können die Energien und Eigenzustände analytisch berechnet werden. Die Energien sind gegeben durch

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega.$$

Die Komponenten  $\langle k | E_n \rangle$  der Eigenzustände können aus den Werten der Wellenfunktion des harmonischen Oszillators (siehe bspw. [3]) an den Ortspunkten  $x_k$  bestimmt werden

$$\langle k | E_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar}\right)^{1/4} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_k\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x_k^2\right).$$

### 4.2 Abschätzung der Approximationsfehler im Energiespektrum

Die Energienäherung  $E_n^A$  des  $n$ -ten Energieniveaus ist gegeben durch

$$E_n^A = \langle E_n^A | \hat{H}^A | E_n^A \rangle.$$

Sei nun zur einfacheren Notation  $|\phi\rangle := |E_n^A\rangle$ . Nimmt man an, dass die Komponenten am erweiterten Rand des Diskretisierungsbereichs verschwinden, also  $\phi_0 = \phi_1 = \phi_2 = \phi_3 = \phi_{N-4} = \phi_{N-3} = \phi_{N-2} = \phi_{N-1} = 0$ , dann gilt für die drei Approximationen des Hamiltonoperators

$$E_n^{\text{VR}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \langle \hat{D}_V \hat{D}_R \rangle, \quad E_n^Z = -\frac{\hbar^2}{2m} \langle \hat{D}_Z^2 \rangle, \quad E_n^{\text{VR}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \langle \hat{D}_{5P}^2 \rangle,$$

wobei die Erwartungswerte im Zustand  $|\phi\rangle$  bzw.  $|E_n^A\rangle$  gemessen werden und gegeben sind durch

$$\begin{aligned} \langle \hat{D}_V \hat{D}_R \rangle &= \frac{\langle \hat{T} \rangle + \langle \hat{T}^\dagger \rangle - \langle \hat{T} \hat{T}^\dagger \rangle - 1}{\Delta x^2}, & \langle \hat{D}_Z^2 \rangle &= \frac{\langle \hat{T}^2 \rangle + \langle (\hat{T}^\dagger)^2 \rangle - 2 \langle \hat{T} \hat{T}^\dagger \rangle}{4 \Delta x^2}, \\ \langle \hat{D}_{5P}^2 \rangle &= \frac{1}{144 \Delta x^2} \left( 64 \left( \langle \hat{T}^2 \rangle + \langle (\hat{T}^\dagger)^2 \rangle \right) - 16 \left( \langle \hat{T}^3 \rangle + \langle (\hat{T}^\dagger)^3 \rangle \right) + \langle \hat{T}^4 \rangle + \langle (\hat{T}^\dagger)^4 \rangle \right. \\ &\quad \left. + 16 \left( \langle \hat{T}^2 \hat{T}^\dagger \rangle + \langle \hat{T} (\hat{T}^\dagger)^2 \rangle \right) - 128 \langle \hat{T} \hat{T}^\dagger \rangle - 2 \langle \hat{T}^2 (\hat{T}^\dagger)^2 \rangle \right). \end{aligned}$$

Durch Einsetzen der Relationen aus Abschnitt 2.4.2 erhält man

$$\begin{aligned} \langle \hat{D}_V \hat{D}_R \rangle &= \Gamma_2 + \frac{1}{12} \Gamma_4 \Delta x^2 + \frac{1}{360} \Gamma_6 \Delta x^4 + \mathcal{O}(\Delta x^5) \\ \langle \hat{D}_Z^2 \rangle &= \Gamma_2 + \frac{1}{3} \Gamma_4 \Delta x^2 + \frac{2}{45} \Gamma_6 \Delta x^4 + \mathcal{O}(\Delta x^5) \\ \langle \hat{D}_{5P}^2 \rangle &= \Gamma_2 - \frac{1}{15} \Gamma_6 \Delta x^4 + \mathcal{O}(\Delta x^5). \end{aligned}$$

Man beachte, dass die  $\Gamma_m$ -Koeffizienten hier implizit vom Eigenzustand  $|E_n^A\rangle$ , also auch von  $n$  abhängig sind. Für  $\langle \hat{D}^2 \rangle$  gilt

$$\langle \hat{D}^2 \rangle = \sum_{k=0}^{N-1} \phi_k^* (\hat{D}^2 \phi)_k = C^2 \cdot \sum_{k=0}^{N-1} \psi^*(x_k) \psi''(x_k),$$

was mit der Summenapproximation (6) und  $C^2 = \Delta x \cdot (1 + \mathcal{O}(\Delta x^5))$  genähert werden kann als

$$\langle \hat{D}^2 \rangle = C^2 \cdot \left( \frac{1}{\Delta x} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \psi''(x) + \mathcal{O}(\Delta x^5) \right) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \psi''(x) + \mathcal{O}(\Delta x^5).$$

Das Integral entspricht dem Koeffizienten  $\Gamma_2$  aus Abschnitt B, sodass folgt

$$\langle \hat{D}^2 \rangle = \Gamma_2 + \mathcal{O}(\Delta x^5).$$

Der Approximationsfehler  $\Delta E_n^A$  des  $n$ -ten Energieniveaus ist gegeben durch

$$\Delta E_n^A := \langle \hat{H} - \hat{H}^A \rangle = \langle \hat{H}_0 - \hat{H}_0^A \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \langle \hat{D}^2 - \hat{D}_A^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \langle \hat{D}_A^2 \rangle - \Gamma_2 \right),$$

wobei  $\hat{D}_A^2$  eine der drei Approximationen  $\hat{D}_V \hat{D}_R$ ,  $\hat{D}_Z^2$  und  $\hat{D}_{5P}^2$  beschreibt. Konkret folgt für diese drei Approximationen aus den obigen Abschätzungen:

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{VR} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{12} \Gamma_4 \Delta x^2 + \frac{1}{360} \Gamma_6 \Delta x^4 \right) + \mathcal{O}(\Delta x^5) \\ \Delta E_n^Z &= \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{3} \Gamma_4 \Delta x^2 + \frac{2}{45} \Gamma_6 \Delta x^4 \right) + \mathcal{O}(\Delta x^5) \\ \Delta E_n^{5P} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{15} \Gamma_6 \Delta x^4 + \mathcal{O}(\Delta x^5). \end{aligned}$$

Man erwartet also die Konvergenzordnung 2 für  $\hat{H}^{VR}$  und  $\hat{H}^Z$ , während der Energiefehler bei  $\hat{H}^{5P}$  mit einer Konvergenzordnung von 4 konvergieren sollte. Dieses Ergebnis basiert auf der Annahme, dass die Wellenfunktion  $\psi(x)$  und die ersten sechs Ableitungen außerhalb von  $(x_4, x_{N-5})$  verschwinden<sup>7</sup>, was wieder durch eine hinreichend schmale kohärente Wellenfunktion erreicht werden kann.

### 4.3 Numerische Bestimmung des Energiespektrums des harmonischen Oszillators

Nun werden die Energiespektren des harmonischen Oszillators numerisch bestimmt. Dazu werden die Eigenwerte und -zustände der Matrixdarstellung der approximierten Hamiltonoperatoren  $\hat{H}^A$  wieder mithilfe von `numpy.linalg.eig` ermittelt. Zunächst wird ein harmonisches Potenzial mit  $\omega = 100$  bei einer Diskretisierung mit 100 Ortspunkten und der Randbedingung  $R = 1$  betrachtet. Die ersten sechs Eigenenergien und -zustände, welche für alle Approximationen des Hamiltonoperators ( $\hat{H}^{VR}$ ,  $\hat{H}^Z$  und  $\hat{H}^{5P}$ ) ermittelt wurden, sind in Abb. 12 visualisiert, zusammen mit den analytischen Ergebnissen aus 4.1<sup>8</sup>. Die Wellenfunktionen der Eigenzustände wurden hier bei den jeweiligen Eigenenergien eingezeichnet, damit die Zuordnung einfacher ist. Dabei wurden die Eigenzustände so skaliert, dass sie rein reell und normiert sind. Man erkennt, dass die Wellenfunktionen bei der VR-Methode den analytischen Wellenfunktionen sehr ähnlich sind und auch die Energien in guter Nähe zu den analytischen liegen. Bei der Z-Methode fällt hingegen auf, dass die Energien jeweils doppelt entartet sind, also jeweils zwei Eigenzustände besitzen. Zudem kann man an der Form der beiden Wellenfunktionen, die zu einem Eigenwert gehören, erkennen, dass ihre Summe eine gute Approximation für die analytische Wellenfunktion ergeben würde. Für abwechselnde  $x$ -Werte hat eine der beiden Wellenfunktionen einen verschwindenden Wert, die andere jedoch nicht. Bei der 5P-Methode treten die ersten vier erwarteten Eigenenergien ( $0,5 \hbar\omega$ ,  $1,5 \hbar\omega$ ,  $2,5 \hbar\omega$  und  $3,5 \hbar\omega$ ) mit sehr guter Genauigkeit und den erwarteten Wellenfunktionen auf. Jedoch befinden sich zwischen diesen Energien noch zwei weitere unerwartete Energien mit Wellenfunktionen, die ein alternierendes Muster aufweisen. Wieso bei den Z- und 5P-Methoden diese Artefakte auftreten, konnte im Rahmen dieser Arbeit leider nicht erörtert werden. Auch bei einer Vergrößerung der Ortsauflösung verschwinden die Artefakte nicht. Bei Veränderung der Randbedingung zu  $R = 0$  treten dieselben Spektren auf, was daran liegt, dass hier ein hinreichend großer Wert für  $\omega$  gewählt wurde.

<sup>7</sup>Hier ist das Intervall  $(x_4, x_{N-5})$  entscheidend, da der Translationsoperator und seine hermitesche Konjugation in  $\hat{D}_{5P}^2$  bis zu vierfach angewandt wird.

<sup>8</sup>Die abgebildete analytische Wellenfunktion wurde hier ebenfalls an den 100 Ortspunkten ausgewertet, weshalb sie nicht vollkommen glatt aussieht.

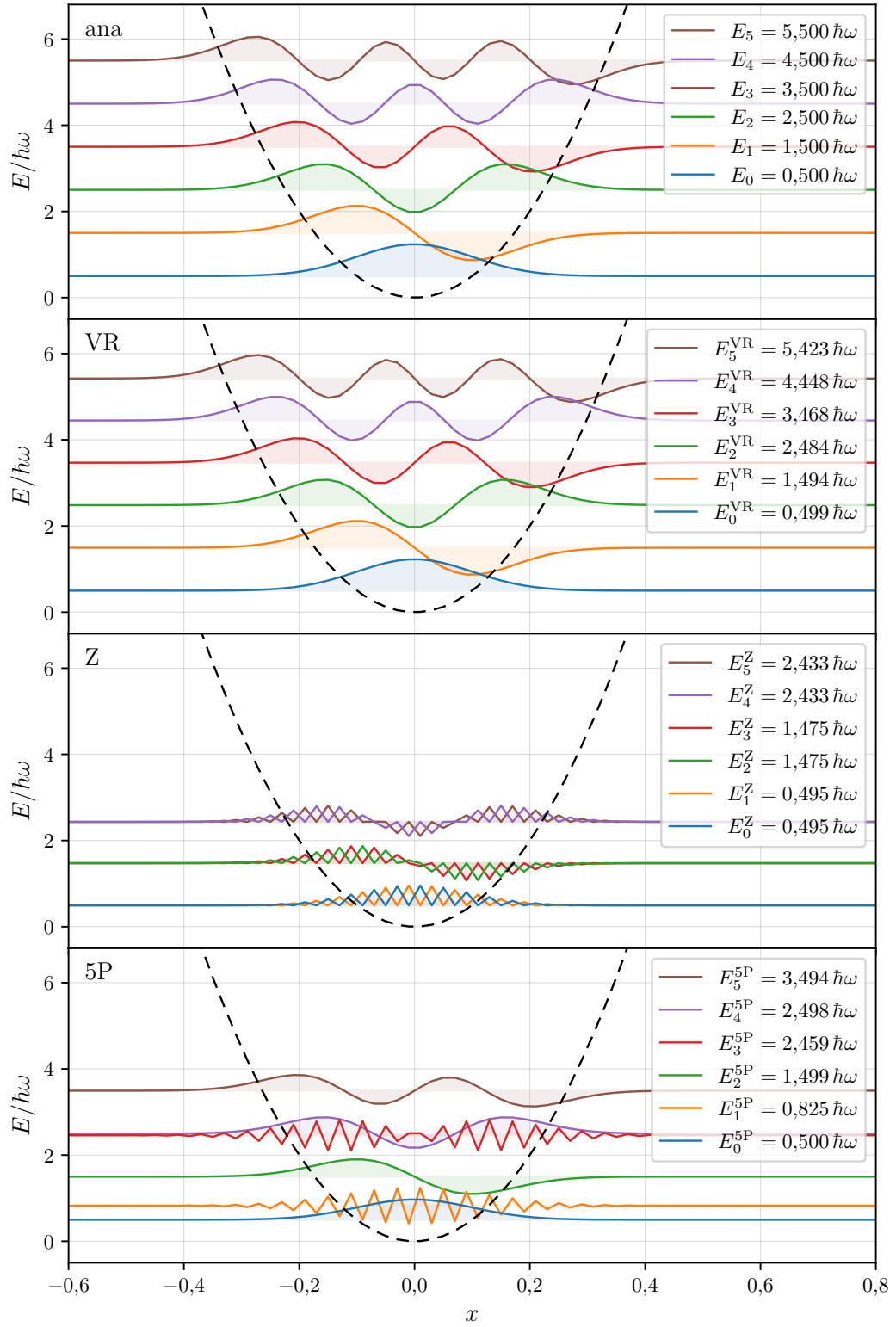


Abbildung 12: Niedrigste Eigenenergien des harmonischen Oszillators bei verschiedenen Approximationen im Vergleich zur analytischen Lösung für  $\omega = 100$ ,  $R = 1$  und  $N = 100$ . Realteil der Wellenfunktionen der Eigenzustände an jeweiligen Energien dargestellt. Potenzial als schwarze gestrichelte Linie dargestellt.



#### 4.4 Numerische Bestimmung des Energiespektrums des anharmonischen Oszillators

Um aus dem harmonischen Oszillator einen anharmonischen Oszillator zu machen, wird die Anharmonizität  $\lambda$  in (4) erhöht. Hier wird  $\lambda = 1$  gewählt, während die restlichen Parameter die gleichen Werte wie im letzten Abschnitt haben. Man erhält die Spektren in Abb. 13, auf denen bei allen Approximationen ein ähnliches Verhalten wie beim harmonischen Oszillator zu erkennen ist. Wie man es beim anharmonischen Oszillator auch erwarten würde, sind hier die Eigenenergien nicht mehr äquidistant verteilt, sondern der Abstand vergrößert sich mit der Energie.

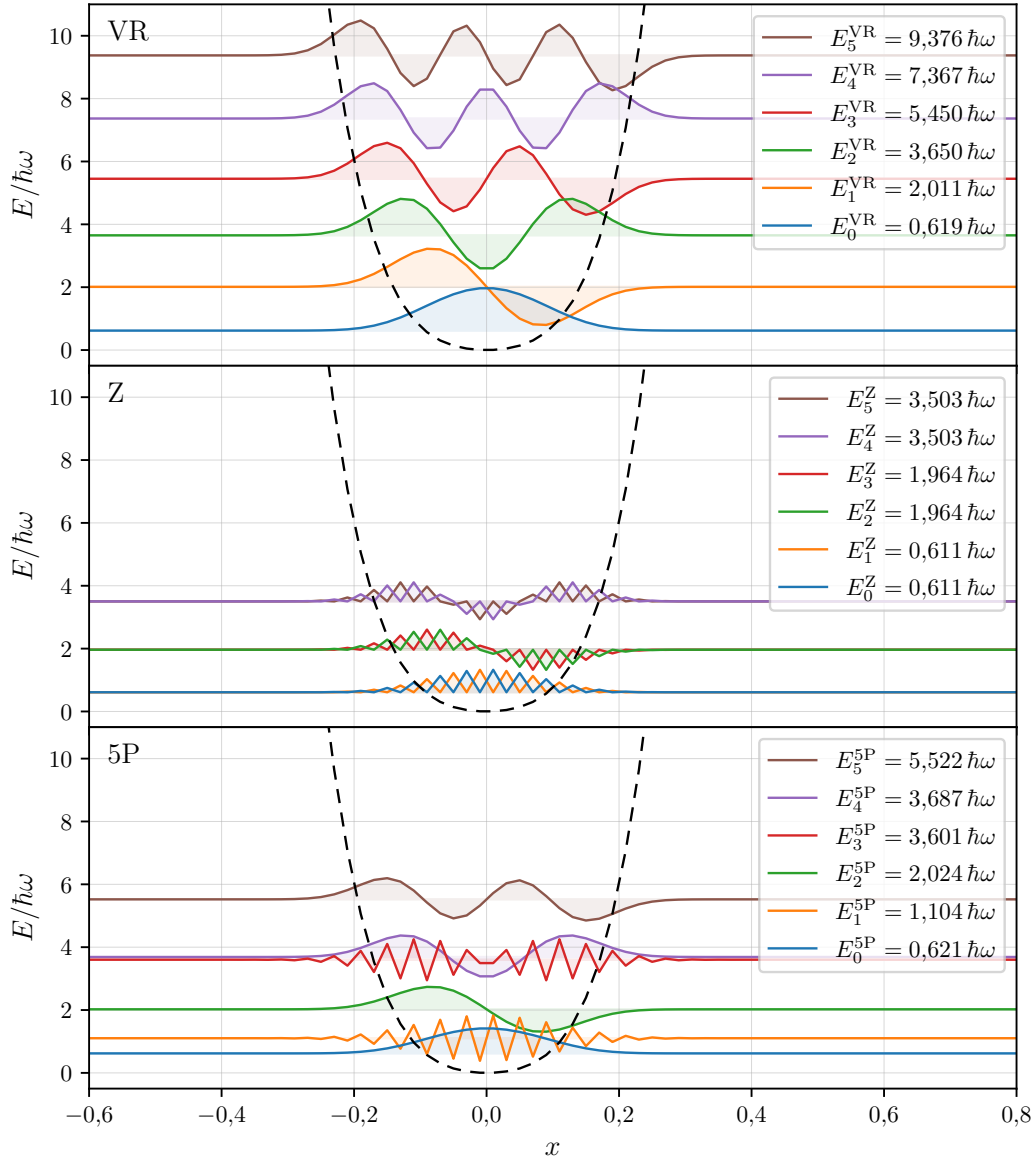


Abbildung 13: Niedrigste Eigenenergien des anharmonischen Oszillators bei verschiedenen Approximationen im Vergleich zur analytischen Lösung für  $\omega = 100$ ,  $\lambda = 1$ ,  $R = 1$  und  $N = 100$ . Realteil der Wellenfunktionen der Eigenzustände an jeweiligen Energien dargestellt. Potenzial als schwarze gestrichelte Linie dargestellt.

#### 4.5 Konvergenz der Eigenenergien

Um den Einfluss der Diskretisierung auf das Energiespektrum zu untersuchen, werden in Abb. 14 die ersten sechs bestimmten Eigenenergien für alle Approximationen des Hamiltonoperators gegen die Schrittweite  $\Delta x$  aufgetragen. Man erkennt deutlich die Konvergenz der Energien für kleiner werdende

$\Delta x$ , wobei die 5P-Methode am schnellsten konvergiert, auch wenn bei der Z- und der 5P-Methode die Energieniveaus nicht den korrekten  $n$ -Werten zugeordnet sind, was im letzten Abschnitt bereits besprochen wurde.

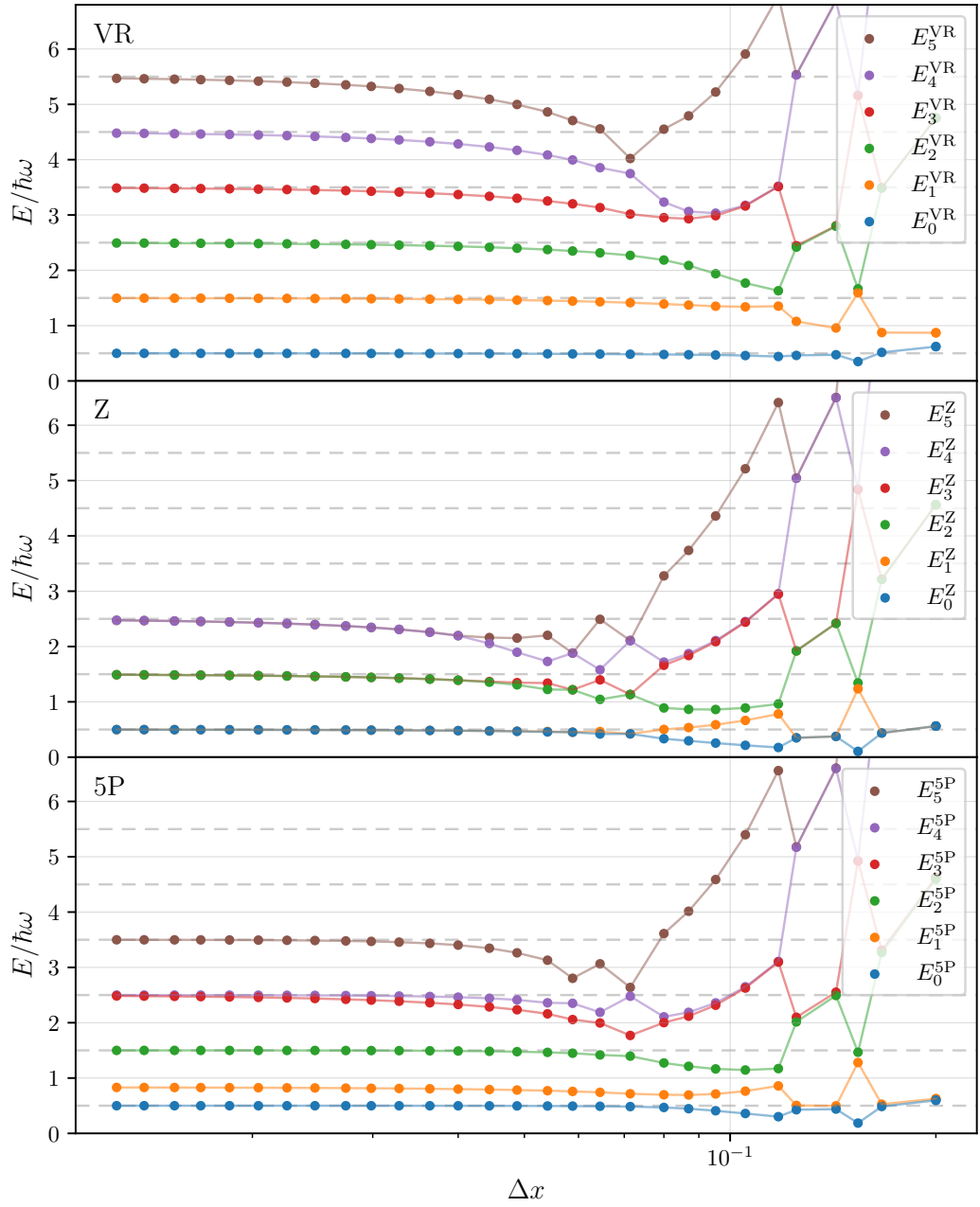


Abbildung 14: Abhängigkeit des Energiespektrums von der Schrittweite  $\Delta x$  für die verschiedenen Approximationen des Hamiltonoperators für  $\omega = 100$  und  $R = 1$ .

Um die Konvergenz besser zu beobachten, wird in Abb. 15 die Abweichung  $\Delta E_0^A := \hbar\omega/2 - E_0^A$  der Grundzustandsenergie für alle Approximationsmethoden logarithmisch gegen die Schrittweite aufgetragen. Man erkennt bei allen Approximationen für hinreichend kleine  $\Delta x$  einen linearen Verlauf, an den jeweils ein Geradenfit angepasst wurde. Die bestimmten Steigungen sind

$$\alpha_{VR} = 2,0019 \pm 0,0003, \quad \alpha_Z = 2,0078 \pm 0,0009, \quad \alpha_{5P} = 3,9888 \pm 0,0012.$$

Diese Steigungen entsprechen in guter Genauigkeit den erwarteten Konvergenzordnungen, die in Abschnitt 4.2 berechnet wurden.

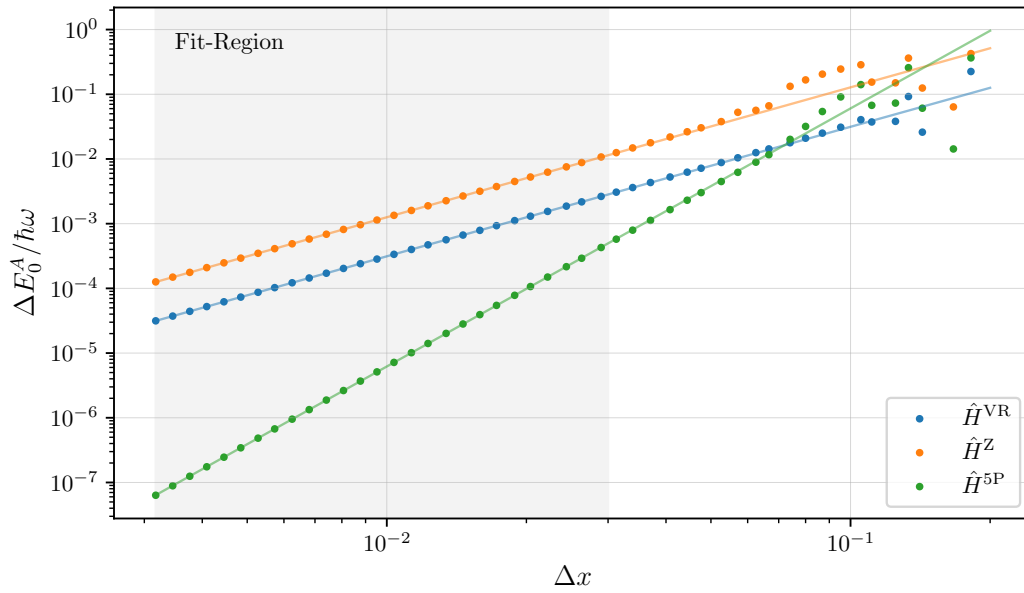


Abbildung 15:  $\Delta x$ -Abhängigkeit des Fehlers der Grundzustandsenergie für die verschiedenen Approximationen des Hamiltonoperators bei  $\omega = 100$  und  $R = 1$  mit Geradenfits ( $\chi^2/dof < 10^{-4}$ ).

## 5 Zeitentwicklung

Im letzten Teil dieser Arbeit soll die Zeitentwicklung eines kohärenten Zustands im harmonischen Oszillatorpotenzial untersucht werden. Diese ist für alle Approximationen des Hamiltonoperators gegeben durch die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\phi(t)\rangle = \hat{H}^A |\phi(t)\rangle.$$

Somit kann ein Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}_A$  eingeführt werden, der den Zustand  $|\phi(t)\rangle$  um einen Zeitschritt  $\Delta t$  entwickelt. Dazu betrachtet man die Taylorentwicklung

$$\begin{aligned} |\phi(t + \Delta t)\rangle &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Delta t^m}{m!} \frac{d^m}{dt^m} |\phi(t)\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Delta t^m}{m!} \left( -\frac{i\hat{H}^A}{\hbar} \right)^m |\phi(t)\rangle \\ &= \exp \left( -\frac{i\Delta t \hat{H}^A}{\hbar} \right) |\phi(t)\rangle. \end{aligned}$$

Der Zeitentwicklungsoperator ist also gegeben durch

$$\hat{U}_A := \exp \left( -\frac{i\Delta t \hat{H}^A}{\hbar} \right).$$

### 5.1 Numerische Simulation der Zeitentwicklung eines kohärenten Zustands

An dieser Stelle soll die Zeitentwicklung möglichst exakt numerisch simuliert werden, sodass die entstehenden Fehler allein auf die Ortsdiskretisierung zurückzuführen sind. Dazu wird der Zeitentwicklungsoperator mithilfe der Matrixexponential-Funktion `scipy.linalg.expm` aus dem Python-Paket `scipy` berechnet, welche intern eine Padé-Approximation durchführt. Die berechnete Zeitentwicklung eines beispielhaften kohärenten Zustands ist in Abb. 16 dargestellt. Man erkennt, dass die Form der Wellenfunktion konstant bleibt und sich lediglich der Mittelwert verändert, wie man es für einen kohärenten Zustand auch erwarten würde.

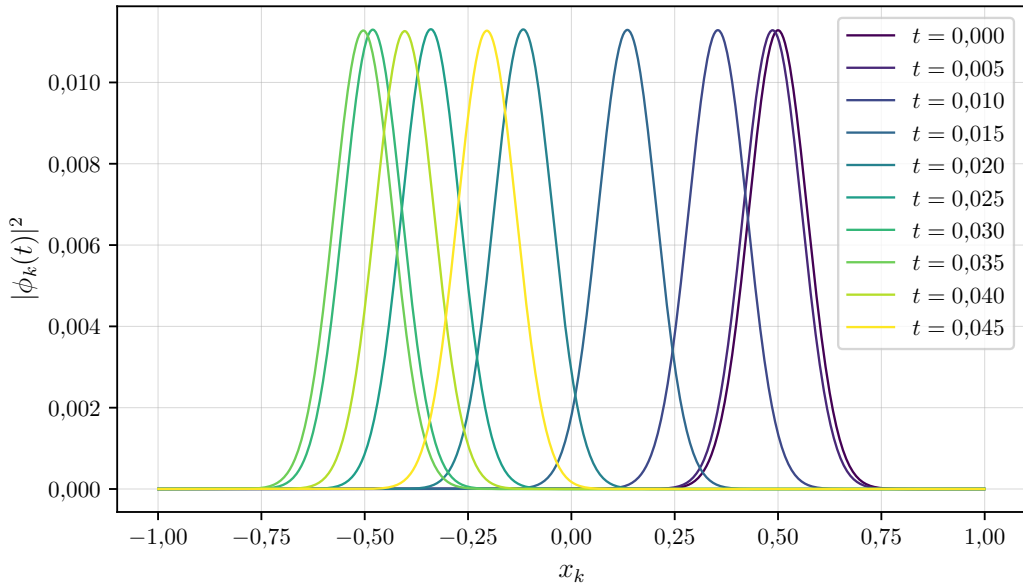


Abbildung 16: Zeitlicher Verlauf von  $|\phi_k(t)|^2$  für einen kohärenten Zustand mit  $\omega = 100$ ,  $q_0 = 0,5$  und  $p_0 = 10$  bei einer Ortsauflösung von  $N = 1000$ .

## 5.2 Zeitentwicklung des Mittelwerts eines kohärenten Zustands

Die Genauigkeit der Zeitentwicklung kann anhand der Zeitentwicklung des Mittelwerts einer kohärenten Wellenfunktion untersucht werden. Der Mittelwert entspricht dem Ort der maximalen Amplitude und wird im Folgenden mit  $x_{\max}(t)$  bezeichnet. In Abb. 17 ist die zeitliche Entwicklung von  $x_{\max}(t)$  für die drei Approximationen des Hamiltonoperators dargestellt. Im Vergleich dazu ist auch der erwartete Verlauf rot eingezeichnet. Dieser kann aus der Wellenfunktion des kohärenten Zustands hergeleitet werden und ist gegeben durch eine Kosinus-Schwingung mit Amplitude  $q_0$  und Frequenz  $\omega$ :

$$q(t) = q_0 \cdot \cos(\omega t),$$

wobei  $q_0 := q(t = 0)$ . Hier ist besonders auffällig, dass es bei der Z-Methode schon sehr früh zu deutlichen Abweichungen vom erwarteten Verlauf kommt, während diese bei der VR-Methode erst später auftreten. Bei der 5P-Methode hingegen sind im abgebildeten Zeitbereich nur sehr kleine Abweichungen zu erkennen.

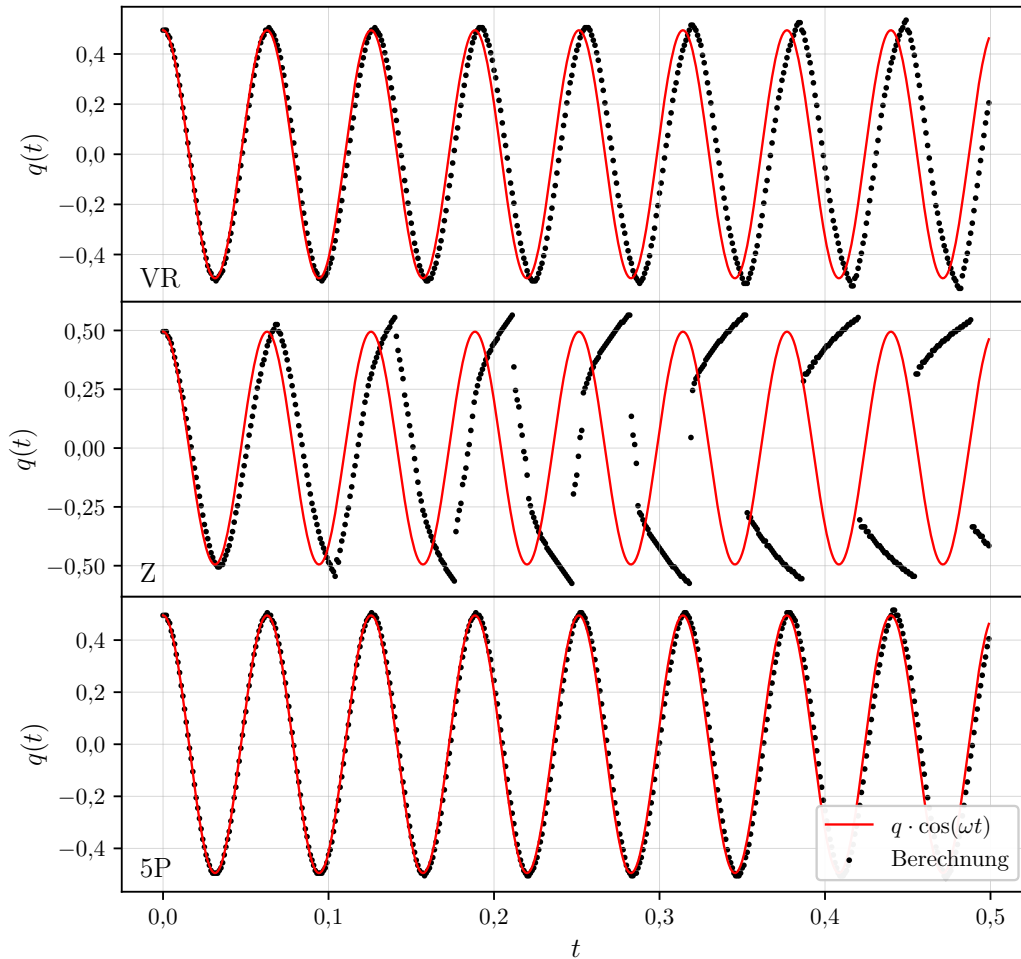


Abbildung 17: Zeitlicher Verlauf von  $q(t)$  im Vergleich zu  $q_0 \cos(\omega t)$  für die verschiedenen Approximationen bei einem kohärenten Zustand mit  $\omega = 100$ ,  $q_0 = 0,5$  und  $p_0 = 10$  und einer Ortsauflösung von  $N = 200$ .

### 5.3 Diskretisierungsabhängigkeit der Fehler

Der Zeitentwicklungsfehler der numerisch bestimmten Mittelwerte kann durch Vergleich des Nulldurchgangs mit dem erwarteten Nulldurchgang der Kosinus-Schwingung quantifiziert werden. Dazu wird das System zunächst für eine bestimmte Anzahl an Perioden  $n$  mit dem Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}(2\pi n/\omega)$  entwickelt und anschließend durch viele kleine Zeitentwicklungen  $\hat{U}(\Delta t)$  abgetastet, um den Nulldurchgang  $t_0^A$  von positiven zu negativen Mittelwerten  $q(t)$  zu finden. Die Messungenauigkeit des Nulldurchgangs kann abgeschätzt werden durch das Abtastintervall  $\Delta t$ . Der erwartete Nulldurchgang  $t_0$  ergibt sich aus der Kosinus-Schwingung, durch

$$0 = q_0 \cos\left(\omega\left(t_0 - \frac{2\pi n}{\omega}\right)\right) \quad \Rightarrow \quad t_0 = \frac{2\pi n + \arccos(0)}{\omega} = \frac{2\pi n + \pi/2}{\omega}.$$

Der Approximationsfehler ist dann gegeben durch  $\Delta t_0^A := t_0 - t_0^A$ . In Abb. 18 sind die berechneten Approximationsfehler in Abhängigkeit von der Ortsschrittweite  $\Delta x$  dargestellt. Man erkennt ähnliche Konvergenzen wie bei der Grundzustandsenergie, das heißt die VR- und Z-Methoden konvergieren ungefähr gleich schnell, während die 5P-Methode deutlich schneller konvergiert. Jedoch sieht man auch, dass die Bestimmung des Nulldurchgangs sehr fehlerbehaftet ist und teilweise deutliche Schwankungen produziert. An die Datenpunkte wurden Geradenfits angepasst, aus denen folgende Steigungen bestimmt wurden:

$$\alpha_{\text{VR}} = 2,003 \pm 0,016, \quad \alpha_Z = 1,985 \pm 0,008, \quad \alpha_{5P} = 4,55 \pm 0,20.$$

Die Steigungen liegen alle in der Nähe der erwarteten Konvergenzordnungen, die auch für die Grundzustandsenergie bestimmt wurden. Die hier gemessene Konvergenzordnung der 5P-Methode ist aufgrund der großen Schwankungen am fehlerbehaftesten und weicht auch am weitesten von der erwarteten Konvergenzordnung ab. Unter Einbeziehung der Ungenauigkeit liegt ihre relative Abweichung ungefähr zwischen 8% und 19%. Mit einer höheren Rechenleistung wäre eine genauere Bestimmung möglich.

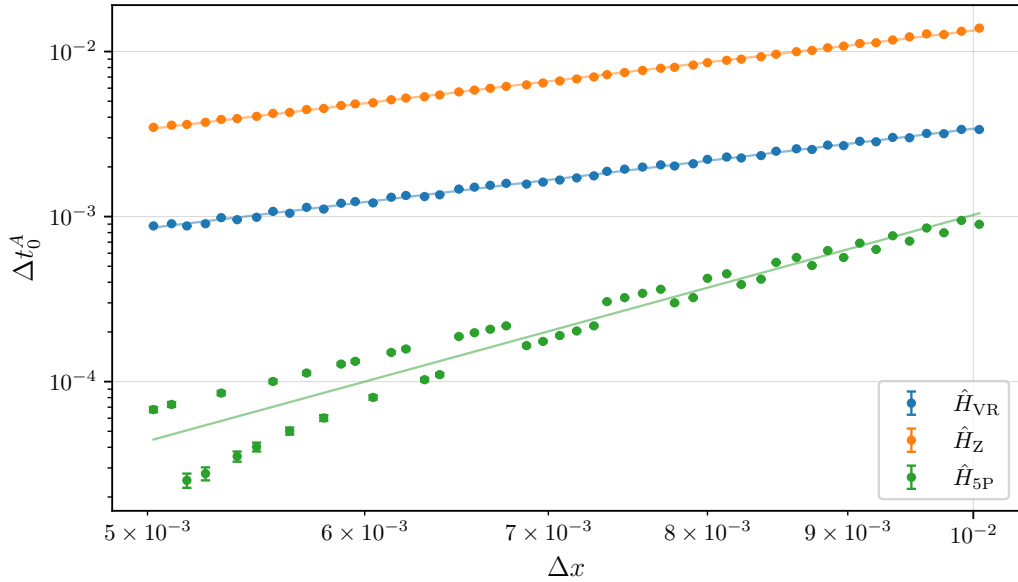


Abbildung 18:  $\Delta x$ -Abhängigkeit des Nulldurchgangfehlers  $\Delta t_0^A$  für die verschiedenen Approximationen des Hamiltonoperators bei kohärentem Zustand mit  $\omega = 100$ ,  $q_0 = 0,5$  und  $p_0 = 10$  mit Geradenfits (VR:  $\chi^2/dof = 5,1 \cdot 10^{-4}$ , Z:  $\chi^2/dof = 1,2 \cdot 10^{-4}$ , 5P:  $\chi^2/dof = 0,077$ ). Abgetastet nach 3 Perioden mit Abtastintervall  $\Delta t = 2,5 \cdot 10^{-6}$ .

## 6 Fazit

Im ersten Teil dieser Arbeit wurde analytisch gezeigt und numerisch verifiziert, dass die Erwartungswerte des Fehleroperators  $\hat{\delta}_A$  des Kommutators von Orts- und Impulsoperator abhängig vom Imaginärteil der Wellenfunktion sind. Für rein reelle Wellenfunktionen verschwinden alle Beiträge einer ungeraden Ordnung in  $\Delta x$  (d.h.  $\Delta x, \Delta x^3, \dots$ ). Vergrößert man den Imaginärteil, kommt es zu einem Übergang, bei dem diese Beiträge zunächst einen kleinen Einfluss nehmen und schließlich dominieren, was durch Variation des Impulsparameters  $p$  eines kohärenten Zustands beobachtet werden konnte. Ist ein hinreichend großer Imaginärteil vorhanden, so entsprechen die Konvergenzordnungen der Erwartungswerte bei allen Approximationen den Konvergenzordnungen der Ableitungsnäherungen, also  $\alpha_R = \alpha_V = 1$  und  $\alpha_Z$  sowie  $\alpha_{5P} = 4$ . Die Randbedingungen der Ortsdiskretisierung haben einen Einfluss, falls die Wellenfunktion am Rand nicht verschwindet. Im Falle des kohärenten Zustands ist dies für hinreichend kleine Frequenzen  $\omega$  der Fall. Hier wurde festgestellt, dass die Konvergenzordnungen der untersuchten Ortsableitungsapproximationen für  $\omega$ -Werte unter 10 deutlich abfällt. Dieser Effekt ist für die Randbedingung  $R = 1$  stärker ausgeprägt. Bei den V- und R-Methoden findet bei  $R = 0$  hingegen keinerlei Abfall der Konvergenzordnung statt. Die Untersuchung des Spektrums des Fehleroperators führte zu dem Ergebnis, dass die Realteile der Eigenwerte bei Erhöhung der Ortsauflösung allesamt mit den erwarteten Konvergenzordnungen gegen 0 konvergieren. Es wurde deutlich, dass die Operatoren  $\hat{\delta}_V$  und  $\hat{\delta}_R$  nicht hermitesch sind, da hier imaginäre Eigenwerte auftreten, welche jedoch auch bei Erhöhung der Ortsauflösung gegen 0 konvergieren. Für  $R = 0$  fiel jedoch auf, dass die Eigenwerte unabhängig von der Ortsauflösung allesamt 1 sind, was anschließend auch analytisch gezeigt werden konnte.

Bei der Untersuchung der Energiespektren des harmonischen Oszillators konnten mit der VR-Methode die analytischen Energien und Eigenzustände sehr gut numerisch approximiert werden. Bei der Z-Methode kam es zwar zu einer zweifachen Entartung aller Energien und zu alternierenden Eigenfunktionen, jedoch passen die bestimmten Energiewerte gut zu den erwarteten Werten. Die 5P-Methode lieferte ebenso die erwarteten Energien, zusätzlich traten hier aber noch andere Energien zwischen den Erwarteten auf. Die Eigenfunktionen der korrekten Energien passen gut zur analytischen Lösung, während die Funktionen der inkorrekten Energien ein alternierendes Muster aufweisen. Wieso es bei der Z- und der 5P-Methode zu diesen fehlerhaften Eigenzuständen kommt, konnte leider nicht geklärt werden. Hier wäre eine genauere mathematische Betrachtung vonnöten, die den Umfang dieser Arbeit übersteigen würde. Die Spektren beim anharmonischen Oszillator warfen ähnliche Probleme auf. Für die Konvergenzordnungen der Grundzustandsenergie konnten hingegen gute numerische Werte erzielt werden, die zu den Ergebnissen aus der analytischen Abschätzung passen ( $\alpha_{VR} = \alpha_Z = 2$  und  $\alpha_{5P} = 4$ ).

Im letzten Teil der Arbeit wurde die Zeitentwicklung eines kohärenten Zustands im harmonischen Oszillator simuliert. Dabei trat wie erwartet eine Kosinus-Schwingung des Mittelwerts der Wellenfunktion auf. Unerwarteterweise wurde das mit der Z-Methode approximierte System im Vergleich zu den anderen Methoden jedoch sehr schnell, also nach kurzer Entwicklungszeit, extrem fehlerbehaftet. Dieses Verhalten konnte leider nicht erklärt werden. Mithilfe des Zeitfehlers eines festen Nulldurchgangs konnte der Fehler der Zeitentwicklung quantifiziert werden und so für verschiedene Ortsauflösungen untersucht werden. Für die VR- und die Z-Methode ergab sich daraus wieder in guter Genauigkeit die erwartete Konvergenzordnung von 2. Bei der 5P-Methode traten besonders für sehr kleine  $\Delta x$  Schwankungen im Verlauf auf, sodass hier nur ein relativ ungenauer Wert von  $\alpha_{5P} = 4,55 \pm 0,20$  bestimmt werden konnte, der dennoch in akzeptabler Nähe zur erwarteten Konvergenzordnung von 4 liegt.

Zusammengefasst wurden in dieser Arbeit viele analytische Überlegungen, besonders bezüglich der Konvergenzordnungen verschiedener Ableitungsapproximationen, mit numerischen Methoden bestätigt. Leider ungeklärt blieben dabei die problematischen Spektren der Z- und 5P-Methode sowie die sehr fehlerbehaftete Zeitentwicklung der Z-Methode. Die hier erlangten Erkenntnisse können dazu verwendet werden, bei zukünftigen Simulationen die Wahl der geeigneten Approximationsmethode zu vereinfachen und etwaige unerwartete Effekte im Konvergenzverhalten besser einordnen zu können.

## A Approximation von Summen als Integral

Die Euler-Maclaurin-Formel für eine Funktion  $f$ , die  $(2m - 1)$ -mal im Intervall  $[a, b]$  stetig differenzierbar sei, lautet [2]

$$\sum_{k=a}^b f(k) = \int_a^b dk f(k) + \frac{f(b) - f(a)}{2} + \sum_{j=1}^m \frac{B_{2j}}{(2j)!} \left( f^{(2j-1)}(b) - f^{(2j-1)}(a) \right) + R_{2m},$$

wobei das Restglied gegeben ist durch

$$R_{2m} = \int_a^b dk \frac{B_{2m+1}(k - \lfloor k \rfloor)}{(2m+1)!} f^{(2m+1)}(k).$$

Sei nun  $f(k) := \psi(x_k)$ , dann gilt  $f^{(j)}(k) = \Delta x^j \psi^{(j)}(x_k)$ , denn  $dx_k/dk = \Delta x$ , und somit

$$\begin{aligned} \sum_{k=a}^b \psi(x_k) &= \frac{1}{\Delta x} \int_{x_a}^{x_b} dx \psi(x) + \frac{\psi(x_b) - \psi(x_a)}{2} \\ &\quad + \sum_{j=0}^m \frac{B_{2j} \Delta x^{2j-1}}{(2j)!} \left( \psi^{(2j-1)}(x_b) - \psi^{(2j-1)}(x_a) \right) + R_{2m} \end{aligned}$$

und

$$R_{2m} = \Delta x^{2m} \int_{x_a}^{x_b} dx \frac{B_{2m+1}((x - \lfloor x \rfloor)/\Delta x)}{(2m+1)!} \psi^{(2m+1)}(x) = \mathcal{O}(\Delta x^{2m}).$$

Nimmt man nun zusätzlich an, dass  $\psi(x)$  sowie die ersten  $2m - 1$  Ableitungen außerhalb des Intervalls  $(x_a, x_b)$  verschwinden, also

$$\psi^{(j)}(x) = 0 \quad \text{für } j = 0, 1, \dots, 2m - 1, x \notin (x_a, x_b),$$

dann folgt

$$\sum_{k=a}^b \psi(x_k) = \frac{1}{\Delta x} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) + \mathcal{O}(\Delta x^{2m}).$$

Für eine Funktion  $\psi(x)$ , die inklusive ihrer ersten  $n$  Ableitungen außerhalb des Intervalls  $(x_a, x_b)$  verschwindet, erhält man also folgende Approximationsformel:

$$\sum_{k=a}^b \psi(x_k) = \frac{1}{\Delta x} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) + \mathcal{O}(\Delta x^{n+1}). \quad (6)$$

## B Abschätzung der Translationssummen

In diesem Abschnitt sollen die Translationssummen, also Summen der Form

$$\sum_{k=l}^{N-j-1} \phi_k^* \phi_{k+j-l}$$

für  $j, l \in \{0, 1, \dots, N - 1\}$  abgeschätzt werden. Sei zunächst  $d := j - l$ , dann kann obige Summe ausgedrückt werden als

$$\sum_{k=j-d}^{N-j-1} \phi_k^* \phi_{k+d}.$$

Die Zustandskomponenten der Form  $\phi_{k+d}$  können wie folgt entwickelt werden:

$$\phi_{k+d} = C \cdot \psi(x_k + d\Delta x) = C \cdot \sum_{m=0}^{\infty} \frac{d^m \Delta x^m}{m!} \psi^{(m)}(x_k).$$



Somit können die Translationssummen ausgedrückt werden durch

$$\begin{aligned} \sum_{k=j-d}^{N-j-1} \phi_k^* \phi_{k+d} &= \sum_{k=j-d}^{N-j-1} \phi_k^* \cdot C \cdot \sum_{m=0}^{\infty} \frac{d^m \Delta x^m}{m!} \psi^{(m)}(x_k) \\ &= C^2 \cdot \sum_{m=0}^{\infty} \frac{d^m \Delta x^m}{m!} \sum_{k=j-d}^{N-j-1} \psi^*(x_k) \psi^{(m)}(x_k). \end{aligned}$$

Nimmt man nun an, dass die Wellenfunktion  $\psi(x)$  inklusive ihrer ersten  $n$  Ableitungen außerhalb von  $(x_l, x_{N-j-1})$  verschwindet, dann gilt für alle  $m \leq n$

$$\left( \psi^* \psi^{(m)} \right)^{(n-m)}(x) = \sum_{i=0}^{n-m} \binom{n-m}{i} \left( \psi^{(i)}(x) \right)^* \psi^{(n-i)}(x) = 0 \quad \text{für } x \notin (x_l, x_{N-j-1}).$$

Demnach kann man mit der Summenapproximation (6) folgern

$$\begin{aligned} \sum_{k=j-d}^{N-j-1} \phi_k^* \phi_{k+d} &= C^2 \cdot \sum_{m=0}^n \frac{d^m \Delta x^m}{m!} \left( \frac{1}{\Delta x} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \psi^{(m)}(x) + \mathcal{O}(\Delta x^{n-m+1}) \right) \\ &\quad + C^2 \cdot \underbrace{\sum_{m=n+1}^{\infty} \frac{d^m \Delta x^m}{m!} \sum_{k=2}^{N-3} \psi^*(x_k) \psi^{(m)}(x_k)}_{=\mathcal{O}(\Delta x^{n+1})}. \end{aligned}$$

Mit  $C = \sqrt{\Delta x} \cdot (1 + \mathcal{O}(\Delta x^{n+1}))$  aus (3) folgt  $C^2 = \Delta x \cdot (1 + \mathcal{O}(\Delta x^{n+1}))$  und somit

$$\sum_{k=j-d}^{N-j-1} \phi_k^* \phi_{k+d} = \sum_{m=0}^n \frac{d^m \Delta x^m}{m!} I_m + \mathcal{O}(\Delta x^{n+1}),$$

wobei

$$I_m := \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \psi^{(m)}(x)$$

und man durch mehrfache partielle Integration findet

$$I_m = (-1)^m \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( \psi^{(m)}(x) \right)^* \psi(x) = (-1)^m \left( \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \psi^{(m)}(x) \right)^* = (-1)^m I_m^*.$$

Für gerade  $m$  gilt somit  $I_m = I_m^*$ , also  $I_m \in \mathbb{R}$ , während man für ungerade  $m$  erhält, dass  $I_m = -I_m^*$ , also  $I_m \in i\mathbb{R}$ . Es gilt  $I_0 = 1$  wegen der Normierung von  $|\psi\rangle$ , sodass man für  $n = 6$  (dies reicht für alle Untersuchungen in dieser Arbeit aus) folgende Abschätzung erhält:

$$\begin{aligned} \sum_{k=j-d}^{N-j-1} \phi_k^* \phi_{k+d} &= 1 + dI_1 \Delta x + \frac{d^2}{2} I_2 \Delta x^2 + \frac{d^3}{6} I_3 \Delta x^3 \\ &\quad + \frac{d^4}{24} I_4 \Delta x^4 + \frac{d^5}{120} I_5 \Delta x^5 + \frac{d^6}{720} I_6 \Delta x^6 + \mathcal{O}(\Delta x^7). \end{aligned}$$

Definiert man nun noch

$$\Gamma_m := \begin{cases} I_m = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \psi^{(m)}(x) & \text{für } m \text{ gerade} \\ -iI_m = -i \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \psi^{(m)}(x) & \text{für } m \text{ ungerade} \end{cases},$$

dann gilt  $\Gamma_m \in \mathbb{R}$  für alle  $m$  und man kann obige Abschätzung schreiben als

$$\begin{aligned} \sum_{k=j-d}^{N-j-1} \phi_k^* \phi_{k+d} &= 1 + d\Gamma_1 \Delta x + \frac{d^2}{2} \Gamma_2 \Delta x^2 + \frac{d^3}{6} \Gamma_3 \Delta x^3 \\ &\quad + \frac{d^4}{24} \Gamma_4 \Delta x^4 + \frac{d^5}{120} \Gamma_5 \Delta x^5 + \frac{d^6}{720} \Gamma_6 \Delta x^6 + \mathcal{O}(\Delta x^7). \end{aligned}$$

In dieser Form sind Realteil und Imaginärteil besser erkenntlich. Schließlich kann man wieder  $d = j - l$  einsetzen und erhält

$$\begin{aligned} \sum_{k=l}^{N-j-1} \phi_k^* \phi_{k+j-l} &= 1 + (j-l)i\Gamma_1\Delta x + \frac{(j-l)^2}{2}\Gamma_2\Delta x^2 + i\frac{(j-l)^3}{6}\Gamma_3\Delta x^3 \\ &\quad + \frac{(j-l)^4}{24}\Gamma_4\Delta x^4 + \frac{(j-l)^5}{120}i\Gamma_5\Delta x^5 + \frac{(j-l)^6}{720}\Gamma_6\Delta x^6 + \mathcal{O}(\Delta x^7). \end{aligned} \quad (7)$$

## Literatur

- [1] S. Biswas. An overview of coherent states. 2015. [https://www.researchgate.net/publication/271210884\\_An\\_overview\\_of\\_Coherent\\_States](https://www.researchgate.net/publication/271210884_An_overview_of_Coherent_States).
- [2] P. J. Davis and P. Rabinowitz. *Methods of numerical integration - Second Edition*. Academic Press, 1983.
- [3] J. J. Sakurai. *Modern quantum mechanics; rev. ed.* Addison-Wesley, Reading, MA, 1994.