F DER HARMONISCHE OSZILLATOR

* Sehen wir nun noch ein Beispiel von 1D Potential, nämlich des harmonische Oszillator. Der harmonische Oszillator spielt eine sehr bedeutende Rolle in der Physik (wir werden später diskutieren warum) und deswegen ist es interessant dies Potential zu studieren. Außerdem, im Gegensatz zu den anderen Beispielen ist die Differentialgleichung hier nicht so trivial, also wir werden ein bisschen die Technik der Lösung solcher Gleichungen auffrischen.

* Betrachten wir zuerst die klassische Version des Problems. Ein Teilchen mit Masse m in einem harmonischen Potential mit einer Frequenz ω fühlt das Potential

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \Longleftarrow \text{Harmonische-Oszillator-Potential}$$

Dieses Potential ergibt eine Kraft $F(x) = -\frac{d}{dx}V(x) = -m\omega^2 x$

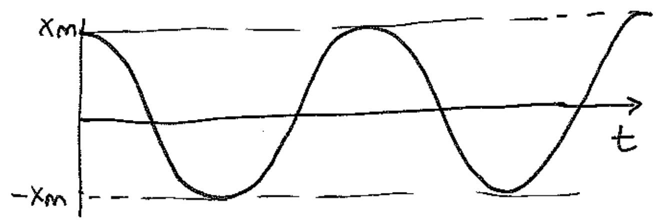
Also die Newtonsche Bewegungsgleichung ist der Form:

$$m\frac{d^2}{dt^2}x = -m\omega^2 x = -Kx$$

(NOTE: Diese ist die Gleichung einer Feder, und K ist die Federkonstante)

Die Lösung dieser Gleichung ist

$$x(t) = X_M \cos(\omega t - \varphi)$$



Wobei $X_M \equiv$ Maximale Amplitude der Oszillazionen. Wenn $x = x_m$, (Umkehrspunkte) ist die Kinetische Energie $E_{kin} = 0$. Also die gesamte Energie ist Potentialenergie $E = \frac{1}{2} m\omega^2 x_M^2$

klassisch betrachtet die Energie des Teilchen in dem Oszillator kann also alle mögliche Werte annehmen, da die maximale Amplitude x_M alle mögliche Werte annehmen kann. Insbesonders die Energie kann zu Null gehen.

Wir werden nun sehen, daß quantenmechanisch:

- Nur diskrete Werte der Energie sind möglich
- Die minimale Energie ist nicht Null.

* Quantenmechanisch mußen wir die Schrödinger-gleichung lösen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 u(x) = E\,u(x)$$

Schreisen wir zuerst diese Gleichung ein bisschen um:

$$-\frac{d^2}{dx^2}u(x) + \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x^2 u(x) = \frac{2mE}{\hbar^2}u(x)$$

Sein $y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x$ (NOTE: $\left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right]^{-1}$ hat Einheiten von Länge, und wird die Oszillatorlänge gennant)

Also (Kettenregel):

$$\frac{d}{dx}u = \left(\frac{d}{dx}y\right)\left(\frac{d}{dy}u\right) = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\frac{du}{dy}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}u = \left(\frac{d}{dx}y\right)\left(\frac{d}{dy}\left[\frac{du}{dx}\right]\right) = \frac{m\omega}{\hbar}\,\frac{d^2u}{dy^2}$$

Dann:

$$-\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)\frac{d^2u}{dy^2} + \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right) y^2 u = \frac{2mE}{\hbar^2}u$$

Also: $\boxed{\dfrac{d^2u}{dy^2} + (\varepsilon - y^2)u = 0}$ ← Dimensionslose Gleichung des harmonischen Oszillators

wobei $\varepsilon = \dfrac{2E}{\hbar\omega}$

- Die physikalische Lösungen dieser Gleichung müssen erfüllen
  $u(y\to\infty) = 0$

(NOTE: in $y\to\infty$ ist das Potential auch ∞, also kein Teilchen darf dort sein.)

- Sehen wir zuerst was passiert wenn $y \gg \varepsilon$.

In diesem Fall $\dfrac{d^2u_\infty}{dy^2} - y^2 u_\infty = 0$

Wir multiplizieren mal $2\dfrac{du_\infty}{dy}$: $2\dfrac{du_\infty}{dy}\dfrac{d^2u_\infty}{dy^2} - y^2\, 2u_\infty \dfrac{du_\infty}{dy} = 0$

$\longrightarrow \dfrac{d}{dy}\left[\left(\dfrac{du_\infty}{dy}\right)^2\right] - y^2 \dfrac{d}{dy}u_\infty^2 = 0$

Wir werden später beweisen, daß für große $y \Rightarrow \dfrac{d}{dy}(y^2u_\infty^2) \simeq y^2\dfrac{du_\infty^2}{dy}$

Also $\dfrac{d}{dy}\left[\left(\dfrac{du_\infty}{dy}\right)^2 - y^2u_\infty^2\right] \simeq 0 \Longrightarrow \left(\dfrac{du_\infty}{dy}\right)^2 - y^2u_\infty^2 = C \equiv \text{KONSTANT}$

Aber für $y \longrightarrow \infty$, $u_\infty \longrightarrow 0$ und $\dfrac{du_\infty}{dy} \to 0$, also $C = 0$

und wir bekommen, daß $\dfrac{du_\infty}{dy} = \pm y\, u_\infty$

Das hat 2 Lösungen $e^{\pm y^2/2}$, aber $e^{+y^2/2}$ macht kein Sinn (da sie in ∞ divergiert), also $u_\infty = e^{-y^2/2}$.

Man kann nun beweisen, daß:

$$\frac{d}{dy}(y^2u_\infty^2) = \frac{d}{dy}\left[y^2 e^{-y^2}\right] = 2ye^{-y^2} - 2y^3e^{-y^2} \xrightarrow[y\gg 1]{\sim} -2y^3e^{-y^2}$$

$$\cong y^2\frac{d}{dy}u_\infty^2$$ wie wir vorher angenommen haben.

* Also für $y \gg \varepsilon$, die Eigenfunktionen $u(y)$ verschwinden wie

$$u(y) \xrightarrow[y \gg \varepsilon]{\sim} e^{-y^2/2}$$

* Wir werden nun die gesamte Eigenfunktion (für alle y) in der Form:

$$u(y) = e^{-y^2/2}\, h(y)$$

annehmen. Dann, die neue Funktion $h(y)$ erfüllt die Gleichung:

$$\frac{d^2 h(y)}{dy^2} - 2y \frac{dh(y)}{dy} + (\varepsilon - 1)\, h(y) = 0$$

* Differentialgleichungen dieser Form können mit Hilfe eines Potenzreihenansatzes gelöst werden:

$$h(y) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m$$

Also
$$\frac{dh}{dy} = \sum_m m\, a_m y^{m-1}$$
$$\frac{d^2 h}{dy^2} = \sum_m m(m-1)\, a_m y^{m-2}$$

Dann:

$$\sum_{m=0}^{\infty} m(m-1)\, a_m y^{m-2} - 2 \sum_{m=0}^{\infty} m a_m y^m + (\varepsilon - 1) \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m = 0$$

$m \to m+2$

$$\sum_{m=0}^{\infty} (m+2)(m+1)\, a_{m+2}\, y^m - 2 \sum_{m=0}^{\infty} m a_m y^m + (\varepsilon - 1) \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m = 0$$

Wir haben also eine Gleichung für die Koeffizienten von y^m:

$$(m+2)(m+1)\, a_{m+2} + (\varepsilon - 1 - 2m)\, a_m = 0$$

Also $$a_{m+2} = \frac{2m-\varepsilon+1}{(m+1)(m+2)}\, a_m$$

Das baut eine Rekursionsformel für die Koeffizienten a_m.

Für gegeben a_0, können wir $a_2, a_4 \dots$ bestimmen. (gerade Funktionen)

Für gegeben a_1, können wir $a_3, a_5 \dots$ bestimmen. (ungerade Funktionen)

* Die Reihe ist im Prinzip unendlich. Nur wenn $\varepsilon = 2m+1$ für irgendeine m hält die Reihe.

  Wir werden nun sehen, daß nur diese Werte von ε eine physikalisch bedeutende Lösung ergeben.

* Wenn die Reihe unendlich ist, dann für große m

$$a_{m+2} \simeq \frac{2}{m}\, a_m$$

Sehen wir nun, daß diese Rekursionsformel ist genau die Rekursionsformel der Koeffizienten der Entwicklung von e^{y^2}

$$e^{y^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\, y^{2n} = \sum_{n=0}^{\infty} a_{2n}\, y^{2n} \overset{m=2n}{=} \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m$$ (Die Summe geht nur für gerade m)

Also $$\frac{a_{m+2}}{a_m} = \frac{a_{2n+2}}{a_{2n}} = \frac{1/(n+1)!}{1/n!} = \frac{1}{n+1} = \frac{1}{(m+2)/2} = \frac{2}{m+2} \xrightarrow{m \gg 1} \frac{2}{m}$$

(Für die ungerade Funktionen man bekommt dieselbe Rekursionsformel für große m für $y e^{y^2}$)

· Also wenn die Reihe zu unendlich geht, dann divergieren die $h(y)$ als

$\to e^{y^2}$ (gerade Lösungen)

$\to y e^{y^2}$ (ungerade Lösungen).

· Da die Eigenfunktion $u(y) = e^{-y^2/2}\, h(y)$
das würde bedeuten, daß $u(y) \xrightarrow[y>>\varepsilon]{} e^{y^2/2}$ oder $y\, e^{y^2/2}$
und das kann nicht sein (wir hätten eine Divergenz sonst).

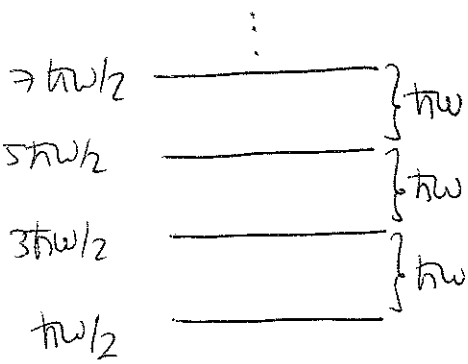
· Also die Reihe darf nicht unendlich sein. Das bedeutet, daß nur bestimmte Werte von ε möglich sind, nämlich

$\varepsilon = 2m+1$ für irgendeine Werte von $m = 0, 1, 2, \ldots$

Da $\varepsilon = \dfrac{2E}{\hbar\omega}$, daß bedeutet, daß die Energie nur diskrete Werte annehmen darf:

$$\boxed{E_m = \frac{\hbar\omega}{2}(2m+1) = \hbar\omega\,(m+1/2)}$$

Also, die Energien des harmonischen Oszillators erfüllen, daß $E_{m+1} - E_m = \hbar\omega$, d.h. ist immer gleich der Energieabstand zwischen Eigenenergies



* Wie sehen die Eigenfunktionen aus?

· Wir haben vorher $u(y) = e^{-y^2/2}\, h(y)$ geschrieben

wobei

$$\frac{d^2 h(y)}{dy^2} - 2y \frac{d}{dy} h(y) + (\varepsilon - 1) h(y) = 0$$

Da $\varepsilon = 2m + 1$, dann für die Eigenenergie $E_m = \hbar\omega(m + 1/2)$

haben wir, daß:

$$\frac{d^2 h_m(y)}{dy^2} - 2y \frac{d}{dy} h_m(y) + 2m\, h_m(y) = 0$$

* Das ist die Gleichung der sogen. Hermite-Polynomen

$$h_m(y) = H_m(y)$$

(Note: Ihr kann diese Polynomen auf den Bücher finden)

z.B.: $H_0(y) = 1$

$H_1(y) = 2y$

$H_2(y) = 4y^2 - 2$

$\vdots$

Diese Polynomen erfüllen die Orthonormalitätsbedingung:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} H_m(y)\, H_n(y)\, dy = 2^n\, n!\, \sqrt{\pi}\; \delta_{n,m}$$

* Also die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators sind der Form:

$$u_n(x) = A_n \, e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\ell}\right)^2} H_n\left(\frac{x}{\ell}\right)$$

wobei $A_n \equiv$ Normalisationskonstante

$$\ell \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \equiv \text{Oszillatorlänge}$$

* Die Normalisationskonstante läßt sich sehr einfach rechnen

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, |u_n(x)|^2 = A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\cancel{\frac{1}{2}}\left(\frac{x}{\ell}\right)^2} H_n^2\left(\frac{x}{\ell}\right) dx \overset{y = x/\ell}{=}$$

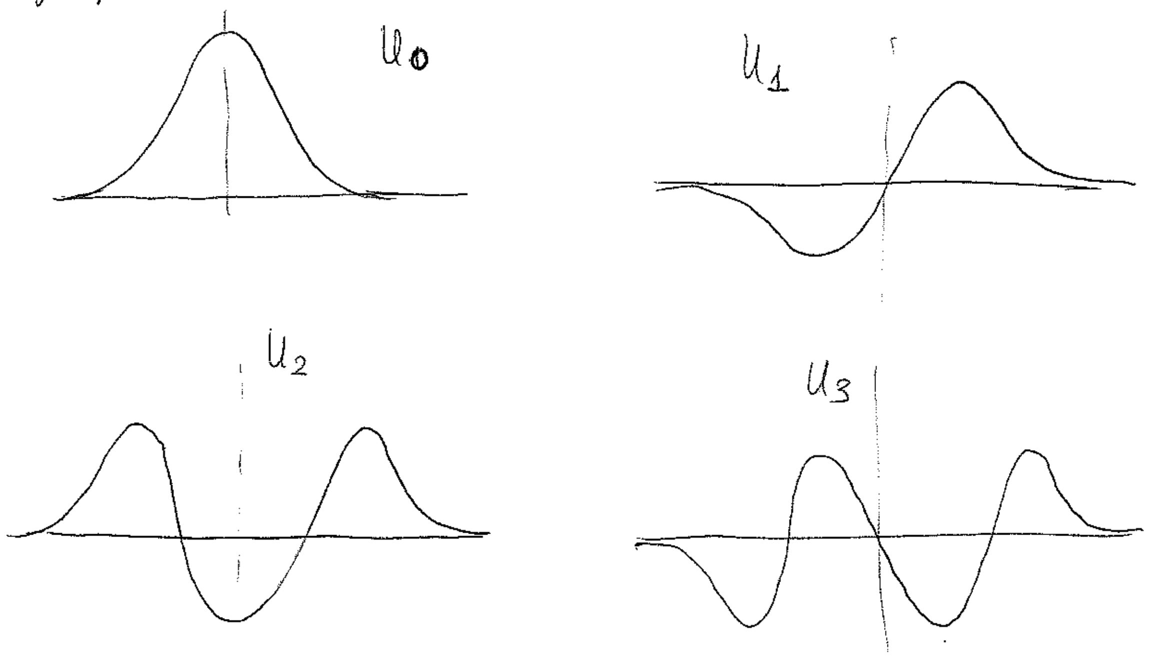
$$= \ell \, A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} dy \, e^{-y^2} H_n^2(y) = \ell \, A_n^2 \, 2^n n! \sqrt{\pi}$$

Also $A_n^2 = \dfrac{1}{2^n n! \sqrt{\pi} \, \ell}$

* Also die Wellenfunktionen (normiert) des harmonischen Oszillators sind:

$$\boxed{u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} \, \ell}} \, e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\ell}\right)^2} H_n\left(\frac{x}{\ell}\right)} \longrightarrow \text{Eigenenergie } E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$$

* Graphisch dargestellt:



usw.

* Da das Potential $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$ symmetrisch $x \leftrightarrow -x$ ist, dann kommutieren $\hat{H}$ und der Paritätsoperator $\hat{\mathbb{P}}$, und deswegen die Eigenfunktionen sind entweder gerade oder ungerade.

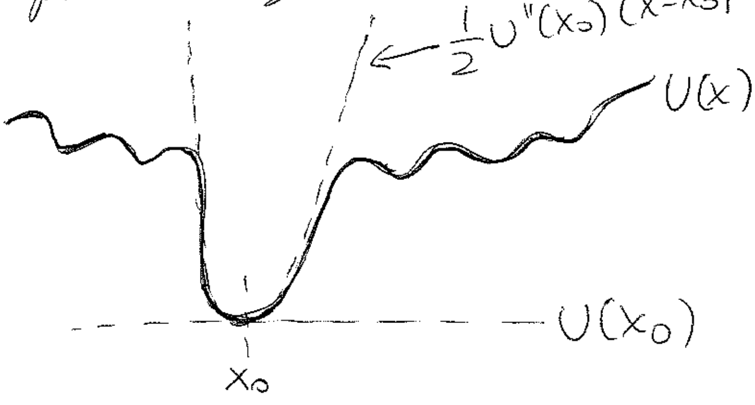
* Der harmonische Oszillator ist sehr wichtig für viele physikalische Probleme, besonders weil in der Nähe eines Minimums eines Potentials $U(x)$:

$$U(x) \overset{\text{TAYLOR}}{\simeq} U(x_0) + \left(\frac{dU}{dx}\right)_{x=x_0} (x-x_0) + \frac{1}{2}\left(\frac{d^2U}{dx^2}\right)_{x=x_0} (x-x_0)^2 + \cdots$$

Für ein Minimum $\left(\frac{dU}{dx}\right)_{x=x_0} = 0$, also:

$$U(x) - U(x_0) \simeq \frac{1}{2} U''(x_0)\,(x-x_0)^2$$

· Graphisch dargestellt:



Und $\frac{1}{2}U''(x_0)(x-x_0)^2 \equiv \frac{1}{2}m\omega^2(x-x_0)^2$

wobei $\omega^2 = \dfrac{U''(x_0)}{m}$ ist eine effektive Frequenz.

Also in der Nähe der Ruhelage können wir das Potential $U(x)$ durch ein harmonisches Potential ersetzen.