

A.13 Oscillator met ladderaanpak

In §A.8 hebben we het geval van de simpele²⁶ harmonische oscillator (SHO) behandeld door de differentiaalvergelijking (moeizaam) op te lossen. Een analytische manier dus. In deze paragraaf gebruiken we de operatoraanpak uit §A.11 en in het bijzonder de laddermethode. Het is een meer algebraïsche techniek. Dit leidt tot een bijzonder elegante oplossing voor het SHO-geval. Dit is ook om andere redenen van groot belang. In subparagraaf §A.13.2 breiden we de operatoraanpak uit. In §A.13.3 passen we dit toe op de SHO. Tenslotte keren we in §A.13.4 weer terug naar de concrete golf functies voor dit geval. Maar nu inclusief de normalisatie van deze eigenfuncties.

A.13.1 De hamiltoniaan van de SHO

We beginnen, net zoals in §A.8, met de tijdsafhankelijke Schrödinger-vergelijking (6.30) op bladzijde 139:

$$Eu = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{m}{2} \omega^2 x^2 u \quad (\text{A.108})$$

Met behulp van de impuls²⁷- en plaats operatoren, zoals ook in §A.11:

$$\hat{p}u := -i\hbar \frac{d}{dx} u \quad (\text{A.109a})$$

$$\hat{x}u := xu \quad (\text{A.109b})$$

wordt dit:

$$Eu = \hat{H}u \quad \text{met} \quad \hat{H} := \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 \hat{x}^2$$

²⁶Simpel, omdat er ook nog gevallen zijn zoals de gedempte oscillator.

²⁷We schrijven nu $\hat{p}$ in plaats van $\hat{p}_x$. Het onderhanden geval is immers 1-dimensionaal. Vandaar ook $\frac{d}{dx}$ in plaats van $\frac{\partial}{\partial x}$.

waar $\hat{H}$ de *hamiltoniaan*²⁸ genoemd wordt. In §A.11 hebben we ook al diverse commutatoren afgeleid. Nu hebben we de volgende nodig:

Commutator x en p
$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$

(A.110)

Een kleine historische noot. Max Born vond (A.110) zelf één van zijn belangrijkste bijdragen. Deze formule, in de vorm $pq - qp = \frac{\hbar}{2\pi i}$, staat dan ook op zijn graf.

A.13.2 Hilbertruimte

We hebben gesproken over de operatoraanpak. We zijn daarbij echter een beetje vaag gebleven over wat het nu voor objecten zijn waarop we een operator kunnen toepassen. In het onderhavig voorbeeld zijn het ééndimensionale complexwaardige (golf-)functies gedefinieerd op de reële rechte $\mathbb{R}$, waarbij normalisatievoorwaarde geldt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} u^*(x)u(x) dx \text{ is eindig} \quad (\text{A.111})$$

Dit kan alleen maar als²⁹

$$\lim_{x \rightarrow \infty} u(x) = 0 \quad \text{en} \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} u(x) = 0 \quad (\text{A.112})$$

Dit soort dingen kunnen we optellen en vermenigvuldigen met een complex getal. Er gelden allerlei (voor de hand liggende) rekenregels voor. Zoiets

²⁸De eigenwaarden van $\hat{H}$ blijken energiewaarden te zijn. Er zou verwarring kunnen ontstaan met de op bladzijde 5.46 genoemde operator $\hat{E}$. Dat is inderdaad een andere operator, maar ook daarvan zijn de eigenwaarden energiewaarden. $\hat{H}$ werkt op tijds-onafhankelijke golf functies, terwijl $\hat{E}$ op tijdafhankelijke functies werkt. De vergelijking $\hat{E}\psi = \hat{H}\psi$ is in feite de tijdafhankelijke Schrödinger-vergelijking.

²⁹Op wat pathologische functies na. Anyway, wij nemen (A.112) gewoon als waar aan.

wordt dan een *complexe vectorruimte* genoemd. Als ook nog een inproduct is gegeven, dan noemt men dit een *Hilbertruimte*. Dit inproduct wordt vaak genoteerd met $\langle f|g \rangle$. Een belangrijke eigenschap (of axioma) is dat dit inproduct (wat een complex getal is) de volgende symmetrie-eigenschap heeft. Wanneer men f en g verwisselt krijgen we de complex geconjugeerde: $\langle g|f \rangle = \langle f|g \rangle^*$. Het inproduct is lineair in de tweede variabele: $\langle g|zf \rangle = z\langle g|f \rangle$. Vanwege $\langle g|f \rangle = \langle f|g \rangle^*$ geldt dan voor de eerste variabele: $\langle zg|f \rangle = z^*\langle g|f \rangle$. Immers:

$$\langle zg|f \rangle = \langle f|zg \rangle^* = (z\langle f|g \rangle)^* = z^*\langle f|g \rangle^* = z^*\langle g|f \rangle$$

Dus bijvoorbeeld: $\langle ig|f \rangle = -i\langle g|f \rangle$. In appendix A.5 van [12] vindt u wat meer details. In ons voorbeeld wordt het inproduct als volgt gegeven:

$$\langle f|g \rangle := \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x) \, dx$$

U ziet dat hiermee de integraal in (A.111) geschreven kan worden als $\langle u|u \rangle$. Uit de eisen die worden gesteld aan het inproduct volgt ook dat dit groter of gelijk aan nul is en de norm van u is dan $\sqrt{\langle u|u \rangle}$ en wordt ook wel geschreven als $|u|$.

Hermitische operator. Voor deze paragraaf hebben we zo meteen nog één (abstract) begrip nodig. Een operator $\hat{Q}$ heet *hermitisch* als voor alle vectoren f en g geldt:

$$\langle f|\hat{Q}g \rangle = \langle \hat{Q}f|f \rangle \quad (\text{A.113})$$

In zekere zin zou je zo'n operator *reëel* kunnen noemen. Nemen we als eenvoudig voorbeeld voor $\hat{Q}$ de vermenigvuldiging met een getal z . Dan geldt

$$\langle f|zg \rangle = z\langle f|g \rangle = \langle z^*f|g \rangle$$

Dus is in dat geval $\hat{Q}$ hermitisch dan en slechts dan als $z^* = z$, dus als z reëel is. Het begrip is belangrijk, omdat de operator die een dynamische variabele representeert, zoals op bladzijde 239 geformuleerd, hermitisch moet zijn.

Zijn eigenwaarden zijn dan ook reëel. Voor deze paragraaf is belangrijk dat $\hat{x}$ en $\hat{p}$ hermitisch zijn. Voor $\hat{x}$ is dit vrij gemakkelijk in te zien:

$$\langle f|\hat{x}g\rangle := \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)\{xg(x)\} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \{xf(x)\}^* g(x) dx =: \langle \hat{x}f|f\rangle$$

Laten we nog even heel precies de overgang van de integrant bekijken:

$$f^*(x)\{xg(x)\} = f^*(x)xg(x) = xf^*(x)g(x) \stackrel{1}{=} \{xf(x)\}^* g(x)$$

Hierbij maken we bij $\stackrel{1}{=}$ gebruik van het feit dat x reëel is. Voor $\hat{p}$ heeft deze afleiding iets meer voeten in de aarde. U moet partieel integreren en ook de rol van i in $\hat{p} := -i\hbar \frac{d}{dx}$ speelt een belangrijke rol. Probeer u het eerst even zelf? We laten de variabele vermelding (x) even weg:

$$\begin{aligned} \langle f|\hat{p}g\rangle &:= \int_{-\infty}^{\infty} f^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} g \right) dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} f^* dg \\ &\stackrel{1}{=} -i\hbar [f^*g]_{-\infty}^{\infty} + i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} g df^* \stackrel{2}{=} 0 + i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} g \frac{d}{dx} f^* dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} i\hbar \frac{d}{dx} f^* g dx \stackrel{3}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} f \right)^* g dx = \langle \hat{p}f|g\rangle \end{aligned}$$

Hier hebben we bij $\stackrel{1}{=}$ partieel geïntegreerd en bij $\stackrel{2}{=}$ is (A.112) gebruikt. Bij $\stackrel{3}{=}$ hebben we als volgt gerekend: $iz^* = (i^*z)^* = (-iz)^*$. U ziet hoe subtiel de mintekens hier hun rol spelen.

A.13.3 Ladders voor de SHO

In deze subparagraaf blijven we volledig op het niveau van de Hilbertruimte. We gebruiken alleen de rekenregels daarvan en beschouwen (A.110) als een (extra) axioma. Dus we gaan uit van een Hilbertruimte met daarin twee hermitische operatoren $\hat{x}$ en $\hat{p}$ waarvoor (A.110) geldt. En dat is alles wat we in deze subparagraaf mogen/zullen gebruiken.

Ontbinding van de hamiltoniaan. Dan gaan we nu aan de slag. We kijken nog eens goed naar de hamiltoniaan:

$$\hat{H} := \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2\hat{x}^2 \quad (\text{A.114})$$

Nu proberen we bij de rechterkant (A.114) weer de som van kwadraten te zien, en net zoals bij (A.82) op bladzijde 246, denken we weer aan de ontbinding $a^2 + b^2 = (a + ib)(a - ib)$. We zouden zoiets kunnen verzinnen:

$$\begin{aligned} \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2\hat{x}^2 &= \left(\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}}\right)^2 + \left(\sqrt{\frac{m}{2}}\omega\hat{x}\right)^2 \\ &\simeq \left(\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + i\sqrt{\frac{m}{2}}\omega\hat{x}\right) \left(\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} - i\sqrt{\frac{m}{2}}\omega\hat{x}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2m}}(\hat{p} + im\omega\hat{x}) \frac{1}{\sqrt{2m}}(\hat{p} - im\omega\hat{x}) = (\hat{a} + i\hat{b})(\hat{a} - i\hat{b}) \end{aligned}$$

We hebben $\simeq$ gebruikt in plaats van $=$ want het betreft hier operatoren, dus zal er geen gelijkheid zijn, maar er komt een extra term bij. Dat zullen we binnenkort ook nog zien gebeuren. Nu kunt u gaan rekenen met $\hat{a}$ en $\hat{b}$ waarvan de definitie hierboven is gesuggereerd: $\hat{a}\hat{b}$ en $\hat{b}\hat{a}$ bepalen en het verband met $\hat{H}$ en dergelijke. Berekeningen die we zo dadelijk ook daadwerkelijk gaan doen maar dan met de volgende twee iets andere operatoren:

verhoog- en verlaagoperator

$$\hat{a}_{\pm} := \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\mp i\hat{p} + m\omega\hat{x}) \quad (\text{A.115})$$

Er zijn een paar redenen om de operatoren zo te kiezen:

1. De imaginaire i bij de operator $\hat{p}$ zetten is nuttig, omdat dan later bij het invullen van $\hat{p} := -i\hbar\frac{d}{dx}$ de zaak reëel wordt;
2. De extra factor $\sqrt{\hbar\omega}$ in de noemer blijkt handig;

3. Sluit aan bij de standaard;

Wanneer we het (operator-)product $\hat{a}_+\hat{a}_-$ gaan uitwerken zullen we de hamiltoniaan weer moeten terugzien. De gedachte was immers dat het daar een soort van ontbinding van was.

$$\begin{aligned}\hat{a}_+\hat{a}_- &= \frac{1}{2m\hbar\omega}(-i\hat{p} + m\omega\hat{x})(i\hat{p} + m\omega\hat{x}) = \frac{1}{2m\hbar\omega}(\hat{p}^2 + m^2\omega^2\hat{x}^2 + im\omega[\hat{x}, \hat{p}]) \\ &\stackrel{1}{=} \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \right) + \frac{1}{2\hbar}i^2\hbar = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} - \frac{1}{2}\end{aligned}$$

Bij $\stackrel{1}{=}$ is onder andere (A.110) toegepast. De hamiltoniaan verschijnt inderdaad weer maar met een correctie omdat $\hat{x}$ en $\hat{p}$ niet commuteren. Evenzo berekenen we $\hat{a}_-\hat{a}_+$ en zetten de resultaten netjes onder elkaar:

$$\hat{a}_+\hat{a}_- = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} - \frac{1}{2} \quad (\text{A.116a})$$

$$\hat{a}_-\hat{a}_+ = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} + \frac{1}{2} \quad (\text{A.116b})$$

Nu willen we toe naar de commutator van $\hat{a}_+$ (en zo meteen ook $\hat{a}_-$) met $\hat{H}$. Daartoe vermenigvuldigen we (A.116a) aan de rechterkant met $\hat{a}_+$ en (A.116b) aan de linkerkant met $\hat{a}_+$:

$$\begin{aligned}\hat{a}_+\hat{a}_-\hat{a}_+ &= \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H}\hat{a}_+ - \frac{1}{2}\hat{a}_+ \\ \hat{a}_+\hat{a}_-\hat{a}_+ &= \frac{1}{\hbar\omega}\hat{a}_+\hat{H} + \frac{1}{2}\hat{a}_+\end{aligned}$$

En we zien dus dat

$$\frac{1}{\hbar\omega}\hat{H}\hat{a}_+ - \frac{1}{2}\hat{a}_+ = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{a}_+\hat{H} + \frac{1}{2}\hat{a}_+ \quad \Rightarrow \quad [\hat{H}, \hat{a}_+] = \hbar\omega\hat{a}_+ \quad (\text{A.117})$$

Op analoge manier kunnen we inzien dat

$$[\hat{H}, \hat{a}_-] = -\hbar\omega\hat{a}_- \quad (\text{A.118})$$

De ladder. Stel nu dat we een oplossing hebben gevonden. Of iets abstracter gezegd: dat we een eigenvector u met eigenwaarde E van $\hat{H}$ hebben:

$$\hat{H}u = Eu$$

TAAK

Kijk wat er gebeurt wanneer we $\hat{H}$ loslaten op de vector $\hat{a}_+u$.

$$\hat{H}\hat{a}_+u = [\hat{H}, \hat{a}_+]u + \hat{a}_+\hat{H}u = \hbar\omega\hat{a}_+u + \hat{a}_+Eu = (E + \hbar\omega)\hat{a}_+u$$

Met andere woorden: $\hat{a}_+u$ is een eigenvector van $\hat{H}$ met eigenwaarde $E + \hbar\omega$. De operator $\hat{a}_+$ voegt als het ware een schepje van $\hbar\omega$ toe aan de energie. Dat is een stapje omhoog op de ladder! We kunnen ook een stapje omlaag, want analoog hebben we ook:

$$\hat{H}\hat{a}_-u = (E - \hbar\omega)\hat{a}_-u$$

Dit verklaart ook de naam van de operatoren $\hat{a}_+$ en $\hat{a}_-$ die we bij (A.115) hebben staan.

Laagste trede. Stel dat we de verlaagoperator herhaaldelijk gaan toepassen. Dan zijn er twee mogelijkheden: (1) dit stopt nooit en de ladder is dus naar beneden toe onbegrensd, of (2) het stopt wel en we hebben dan dus een vector u_0 waarvoor moet gelden:

$$\hat{a}_-u_0 = 0 \tag{A.119}$$

Laten we van het laatste geval uitgaan. We passen $\hat{H}$ toe op u_0 :

$$\hat{H}u_0 \stackrel{1}{=} (\hbar\omega \hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\hbar\omega)u_0 = \hbar\omega \hat{a}_+\hat{a}_-u_0 + \frac{1}{2}\hbar\omega u_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega u_0$$

Stap $\stackrel{1}{=}$ volgt uit (A.116a). We zien hier dat u_0 een eigenfunctie is met eigenwaarde $\frac{1}{2}\hbar\omega$. Als we de verhoogoperator $\hat{a}_+$ nu herhaaldelijk toepassen dan krijgen we de eigenwaarden $\frac{1}{2}\hbar\omega, 1\frac{1}{2}\hbar\omega, 2\frac{1}{2}\hbar\omega, \dots$. We zien dus het resultaat (A.65) van bladzijde 223 terug.

De eigenvectoren en de teloperatoren. Bij elke eigenwaarde $E_n = \frac{1}{2}\hbar\omega + n\hbar\omega$ hoort een eigenvector u_n , ook wel eigentoestand genoemd. Aan de vergelijkingen (A.116) zien we dat deze eigenvectoren ook eigenvectoren van de operatoren $\hat{a}_+\hat{a}_-$ en $\hat{a}_-\hat{a}_+$ zijn. Laten we eens kijken naar de eerste via (A.116a):

$$\begin{aligned}\hat{a}_+\hat{a}_-u_n &= \left(\frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} - \frac{1}{2}\right)u_n = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H}u_n - \frac{1}{2}u_n = \frac{1}{\hbar\omega}E_nu_n - \frac{1}{2}u_n \\ &= \frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{1}{2}\hbar\omega + n\hbar\omega\right)u_n - \frac{1}{2}u_n = \left(\frac{1}{2} + n\right)u_n - \frac{1}{2}u_n = n u_n\end{aligned}$$

Dus de eigenwaarde van $\hat{a}_+\hat{a}_-$ is simpelweg het getal n . Deze operator telt als het ware het aantal energiekwanta dat de toestand telt. Op dezelfde manier vinden we de eigenwaarde $n+1$ voor $\hat{a}_-\hat{a}_+$ met behulp van (A.116b). Samenvattend:

$$\hat{a}_+\hat{a}_-u_n = n u_n \quad (\text{A.120a})$$

$$\hat{a}_-\hat{a}_+u_n = (n+1) u_n \quad (\text{A.120b})$$

De eigenvectoren. We kunnen ook zuiver algebraïsch een verband tussen deze eigenvectoren vinden. Daarvoor hebben we nu ook het inproduct nodig. We nemen aan dat alle u_n genormaliseerd zijn, dus dat $|u_n|^2 = \langle u_n|u_n \rangle = 1$. Ook weten we dat als we $\hat{a}_+$ toepassen op u_n dat we dan een eigenvector met eigenwaarde E_{n+1} krijgen. Dat is dus op een constante na u_{n+1} . Laten we deze constante even c_n noemen. We hebben dus:

$$\hat{a}_+u_n = c_nu_{n+1} \quad \Rightarrow \quad u_{n+1} = \frac{1}{c_n}\hat{a}_+u_n \quad (\text{A.121})$$

Nu blijkt dat we de factoren c_n precies kunnen bepalen. We berekenen van de beide zijden van (A.121) de norm in het kwadraat. Van de rechterkant is dit het eenvoudigst:

$$\langle c_nu_{n+1}|c_nu_{n+1} \rangle = c_n^*c_n\langle u_{n+1}|u_{n+1} \rangle = |c_n|^2 \quad (\text{A.122})$$

De linkerkant wordt $\langle \hat{a}_+ u_n | \hat{a}_+ u_n \rangle$. Als u hier de definitie van $\hat{a}_+$ invult komt u er ook uit. We volgen een iets andere weg. We laten zien hoe we de rechter $\hat{a}_+$ van $\langle \hat{a}_+ u_n | \hat{a}_+ u_n \rangle$ naar de linkerkant kunnen brengen, dus iets als: $\langle \hat{a}_+ u_n | \hat{a}_+ u_n \rangle = \langle \hat{B} \hat{a}_+ u_n | u_n \rangle$. Als $\hat{a}_+$ hermitisch zou zijn was dat makkelijk, immers dan zou $\hat{B} = \hat{a}_+$ kunnen zijn. De operatoren $\hat{p}$ en $\hat{x}$ zijn in ieder geval wel hermitisch dus laten we eens kijken naar de factor $(-i\hat{p} + m\omega\hat{x})$ van $\hat{a}_+$:

$$\begin{aligned} \langle f | (-i\hat{p} + m\omega\hat{x})g \rangle &= -i\langle f | \hat{p}g \rangle + m\omega\langle f | \hat{x}g \rangle = -i\langle \hat{p}f | g \rangle + m\omega\langle \hat{x}f | g \rangle \\ &= \langle i\hat{p}f | g \rangle + \langle m\omega\hat{x}f | g \rangle = \langle (i\hat{p} + m\omega\hat{x})f | g \rangle \end{aligned}$$

We zien aan de linkerkant dus $i\hat{p} + m\omega\hat{x}$, het hoofdbestanddeel van $\hat{a}_-$, verschijnen. We kunnen concluderen dat

$$\langle f | \hat{a}_+ g \rangle = \langle \hat{a}_- f | g \rangle$$

We zien dus dat we $\hat{a}_+$ naar links kunnen brengen door hem te wijzigen in $\hat{a}_-$. Voor (de lengte van) de linkerkant van (A.121) krijgen we nu (bij $\stackrel{1}{=}$ is (A.120b) gebruikt):

$$\langle \hat{a}_+ u_n | \hat{a}_+ u_n \rangle = \langle \hat{a}_- \hat{a}_+ u_n | u_n \rangle \stackrel{1}{=} \langle (n+1)u_n | u_n \rangle = (n+1)\langle u_n | u_n \rangle = n+1$$

Combineren we dit met (A.122) dan krijgen we dus:

$$n+1 = |c_n|^2 \quad \Rightarrow \quad c_n = \sqrt{n+1}$$

Moeten we niet schrijven $|c_n|$ in plaats van c_n ? Formeel wel want er zou nog een complexe factor $e^{i\varphi}$ bij kunnen komen, maar die slokken we dan wel op in de u_n . Daarmee blijft deze laatste immers genormaliseerd. De recurrente betrekking (A.121) wordt nu dus:

$$u_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}_+ u_n$$

(A.123)

Orthonormale basis. Via de recursieve relatie (A.123) hebben we ervoor gezorgd, dat als de eerste, u_0 , genormaliseerd is ($|u_0| = 1$) dan zijn alle volgende het ook. Dus allemaal. Maar ze staan ook allemaal loodrecht op elkaar, dat wel zeggen dat $\langle u_n | u_m \rangle = 0$ als $n \neq m$. Dit is een heel algemene eigenschap van twee eigenvectoren met verschillende eigenwaarden. Stel namelijk dat u_1 en u_2 eigenvectoren zijn met eigenwaarden $q_1 \neq q_2$, van een hermitische operator $\hat{Q}$. Dan hebben we:

$$\begin{aligned} \langle u_1 | \hat{Q} u_2 \rangle &= \langle \hat{Q} u_1 | u_2 \rangle \Rightarrow \langle u_1 | q_2 u_2 \rangle = \langle q_1 u_1 | u_2 \rangle \\ \Rightarrow q_2 \langle u_1 | u_2 \rangle &= q_1 \langle u_1 | u_2 \rangle \Rightarrow \langle u_1 | u_2 \rangle = 0 \end{aligned}$$

A.13.4 De SHO golffuncties

We hebben de energiewaarden teruggevonden via een puur algebraïsche methode. We keren nu terug naar de concrete golffuncties. We hopen deze te kunnen ontdekken in overeenstemming met de functies die we in §A.8 hebben gevonden. Voor u_0 kan dat via de vergelijking (A.119) en als we deze eenmaal hebben dan kunnen we via de recursieve relatie (A.123) de overige oprollen. Het is dus zaak dat we een expliciete vorm voor de operatoren $\hat{a}_{\pm}$ vinden. Het blijkt dat de herschaling die we op bladzijde 219 hadden ingevoerd het leven nu ook weer makkelijker maakt. We gaan dus over op de variabele y in plaats van x met de volgende verbanden:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} y \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d}{dy}$$

TAAK

Zet de definities van $\hat{p}$ en $\hat{x}$ bij (A.109) om naar de variabele y en vul dit in bij de formule voor de operatoren $\hat{a}_{\pm}$ bij (A.115). Laat dit meteen werken op een functie $u(y)$.

Met de definities (A.109) krijgen we:

$$\begin{aligned}\hat{p}u &= -i\hbar \frac{d}{dx}u = -i\hbar \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d}{dy}u \Rightarrow i\hat{p}u = \sqrt{m\omega\hbar}u' \\ \hat{x}u &= xu = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}y \Rightarrow m\omega\hat{x}u = \sqrt{m\omega\hbar}yu\end{aligned}$$

Hierbij hebben we meteen $i\hat{p}u$ en $m\omega\hat{x}u$ ook bepaald zodat we die kunnen invullen bij de (definitie van) de operatoren $\hat{a}_{\pm}$ bij (A.115):

$$\hat{a}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\mp\sqrt{m\omega\hbar}u' + \sqrt{m\omega\hbar}yu) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mp u' + yu) \quad (\text{A.124})$$

We zien inderdaad, dankzij de herschaling, een redelijk simpele uitdrukking.

De startfunctie. We beginnen uiteraard met u_0 . Hiervoor hebben we de vergelijking $\hat{a}_-u_0 = 0$. Dit wordt nu dus (we noteren voor het gemak even u in plaats van u_0):

$$\hat{a}_-u = 0 \quad \stackrel{(\text{A.124})}{\Rightarrow} \quad u' + yu = 0$$

Hiervan weet u de oplossing eigenlijk al, want die kwam op bladzijde 220 voorbij. Een nette manier om deze te vinden is als volgt:

$$\begin{aligned}u' + yu = 0 &\Rightarrow \frac{u'}{u} = -y \Rightarrow \frac{d}{dy} \{\ln(u)\} = -y \\ &\Rightarrow \ln(u) = -\frac{1}{2}y^2 + C \Rightarrow u = De^{-\frac{1}{2}y^2}\end{aligned}$$

We hebben, op de constante D na, de oplossing dus gevonden. We kunnen deze constante ook nog wel bepalen, want we willen graag dat functie genormaliseerd is. Dus dat de integraal van $|u_0|^2$ 1 is. We moeten deze integratie echter wel met de ‘echte’ variabele x doen:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} D^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx \stackrel{!}{=} D^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} \Rightarrow D = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}$$

Bij ¹ hebben we gebruik gemaakt van de Gaussintegraal (A.59) op bladzijde 217. Conclusie:

$$u_0(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad (\text{A.125})$$

Alle functies. Dan kunnen we nu via de recursieve relatie (A.123), vertrekkend vanuit (A.125) $u_1, u_2, u_3, \dots$ achtereenvolgens gaan bepalen. Merk op dat deze automatisch genormaliseerd zijn, want dat lag ten grondslag aan de afleiding van (A.123) en het startpunt (A.125) is het al. Laten we (A.123) combineren met de uitdrukking voor $\hat{a}_+$ bij (A.124):

$$u_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \frac{1}{\sqrt{2}} (yu_n - u'_n) \quad (\text{A.126})$$

We werken weer met de variabele y en $u_0 = De^{-\frac{1}{2}y^2}$. Ik zou u aanraden om nu een paar volgende op een kladpapiertje uit te rekenen, dan ziet u het patroon. Merk op dat $\frac{d}{dy} \left(e^{-\frac{1}{2}y^2} \right) = -ye^{-\frac{1}{2}y^2}$. Vooruit ik doe u_1 :

$$u_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (yu_0 - u'_0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ yDe^{-\frac{1}{2}y^2} - (-Dye^{-\frac{1}{2}y^2}) \} = D \frac{1}{\sqrt{2}} 2ye^{-\frac{1}{2}y^2}$$

U zult merken dat u_n steeds van de volgende vorm is:

$$u_n(y) = A_n f_n(y) e^{-\frac{1}{2}y^2} \quad (\text{A.127})$$

Dus een constante A_n (we hadden al $A_0 = D$ en $A_1 = D \frac{1}{\sqrt{2}}$) en een functie f_n van y (we hadden al $f_0(y) = 1$ en $f_1(y) = 2y$).

TAAK

Vul u_n zoals in (A.127) in bij (A.126). Bepaal zo een uitdrukking voor u_{n+1} en constateer dat die weer van de vorm (A.127) is en bepaal zo recursieve betrekkingen voor A_n en f_n .

We berekenen via de productregel eerst even u'_n :

$$u'_n = \frac{d}{dy} \left(A_n f_n e^{-\frac{1}{2}y^2} \right) = A_n \left(f'_n e^{-\frac{1}{2}y^2} - f_n y e^{-\frac{1}{2}y^2} \right) = A_n (f'_n - f_n y) e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

Dan is de term tussen haakjes van (A.126):

$$\begin{aligned} y u_n - u'_n &= y A_n f_n e^{-\frac{1}{2}y^2} - A_n (f'_n - f_n y) e^{-\frac{1}{2}y^2} \\ &= A_n (y f_n - f'_n + f_n y) e^{-\frac{1}{2}y^2} = A_n (2y f_n - f'_n) e^{-\frac{1}{2}y^2} \end{aligned}$$

Dus de complete vorm van (A.126) wordt nu:

$$u_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \frac{1}{\sqrt{2}} A_n (2y f_n - f'_n) e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

En hierin herkennen we dezelfde vorm als (A.127) als we nemen:

$$A_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \frac{1}{\sqrt{2}} A_n \quad (\text{A.128a})$$

$$f_{n+1} = 2y f_n - f'_n \quad (\text{A.128b})$$

Het herhaald toepassen van (A.128a) en de startwaarde $A_0 = D = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}$ leidt tot:

$$A_n = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{n!} \sqrt{2^n}} \quad (\text{A.129})$$

Boeiender is het gevolg van de herhaalde toepassing van (A.128b). We zien dat als we f_n hebben verkregen, we de volgend kunnen maken door f_n met $2y$ te vermenigvuldigen en daar vervolgens de afgeleide van f_n vanaf trekken. Startend met $f_0(y) = 1$, verkrijgen we eerst simpelweg $f_1(y) = 2y$ (die hadden we bij u_1 als gezien). Als we verder gaan dan zien we:

$$\begin{aligned} f_2(y) &= 4y^2 - 2 \\ f_3(y) &= 8y^3 - 4y - 8y = 8y^3 - 12y \\ f_4(y) &= 16y^4 - 24y^2 - 24y^2 + 12 = 16y^4 - 48y^2 + 12 \\ f_5(y) &= 32y^5 - 96y^3 + 24y - 64y^3 + 96y = 32y^5 - 160y^3 + 120y \end{aligned}$$

Et cetera! Verbazen mogen we ons niet, verblijden wel. We zien de Hermite veeltermen van bladzijde 225 weer verschijnen! En dat moet natuurlijk ook want die oplossing hadden we, op een heel andere manier al een keer gevonden. Verassend is misschien wel dat we ze *exact* terugvinden (op een constante na had ook gekund). We zien immers dat de coëfficiënt van y^n steeds 2^n is, en dat was de conventie. Bovenstaande elegante manier om ze recursief te genereren werpt dus ook licht op deze conventie. We hebben dus simpelweg $f_n = H_n$ en (A.127) kan nu met behulp van (A.129) onder terugkeer naar de variabele x via $y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ worden geschreven als:

De SHO golffuncties

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

Naschrift. In het begin van deze paragraaf hebben we gezegd dat de harmonische oscillator, en in het bijzonder de ladderaanpak daarvan, van groot belang is. Waarom is dat zo? We hebben het nog niet gehad over *velden*. Denken we aan elektromagnetische golven, dan weten we (klassiek) dat daar op één punt in de ruimte de veldsterkten ook (harmonisch) heen en weer bewegen. Bij de *kwantumvelden theorie* (QFT) blijkt dan ook dat het veld kan worden opgevat als een (oneindige) verzameling gekoppelde oscillatoren. En ook daar zitten dan natuurlijk kwanta van energie in. En dat zijn precies de fotonen! Maar, net als bij de ingeping van de Broglie, ligt het voor de hand dat dit niet alleen voor de fotonen als deeltjes waar is maar voor alle (elementaire) deeltjes. Zo blijkt de QFT meteen een theorie voor deeltjes te worden. Deze theorie maakt het mogelijk om deeltjes te laten ontstaan en ze kunnen ook weer verdwijnen. In dat kader spreekt men dan ook wel over creatie- en annihilatieoperatoren in plaats van verhoog- en verlaagoperatoren.

Bibliografie

- [1] Harm van der Lek. *$E = mc^2$ en hoe u dat zelf had kunnen bedenken*. Vdlek.nl, augustus 2019.
- [2] Niels Bohr. *On the Constitution of Atoms and Molecules*. Philosophical Magazine, juli 1913.
- [3] Jim Baggott. *The Quantum Story*. Oxford University Press, december 2016.
- [4] Robert M. Eisberg. *Fundamentals of modern Physics*. John Wiley & Sons, 1967.
- [5] Leonard I. Schiff. *Quantum Mechanics. Third Edition*. McGraw-Hill Book Company (online te lezen), 1968.
- [6] Alastair I.M. Rae. *Quantum Mechanics. Fifth Edition*. Tayler & Francis, 2008.
- [7] Robert B. Leighton Richard P. Feynman and Matthew Sands. *The Feynman Lectures on Physics Volume I, Mainly mechanics, radiation, and heat*. Addison Wesley, 2005. Ook op internet raadpleegbaar.
- [8] Robert B. Leighton Richard P. Feynman and Matthew Sands. *The Feynman Lectures on Physics Volume III, Quantum mechanics*. Addison Wesley, 2005. Ook op internet raadpleegbaar.

- [9] Michael Dayah. *Dynamic periodic table (website)*.
<https://www.ptable.com/>, 2017.
- [10] David J. Griffiths Darrell F. Schroeter. *Introduction to Quantum Mechanics. Third Edition*. Cambridge University Press, 2018.
- [11] Max Bron. *Atomic Physics. Eight Edition*. Dover Publications, 1989.
- [12] Harm van der Lek. *Elektromagnetisme, Relativiteit en hoe u dat zelf had kunnen bedenken*. Vdlek.nl, 2022.

[5] is een klassieker. Bevat zeer veel informatie. Is echter wat droog geschreven. [6] is wat toegankelijker en daar heb ik veel van opgestoken toen ik de QM opnieuw ging bestuderen. [10] heb ik wat later ontdekt en dit is het boek dat ik zou aanraden als u iets zoekt naast het huidige. Weliswaar valt het met de deur in huis (Schrödinger-vergelijking op praktisch de eerste pagina), dus weinig motivatie voor het begin van de QM, laat staan de historie, maar verder is de uitleg vaak heel helder.