Kapitel 5

Harmonischer Oszillator

5.1 Erzeuger und Vernichter

Der Hamiltonoperator des Harmonischen Oszillators,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2 \tag{5.1}$$

kann durch Einführung sog. *Leiteroperatoren*

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{q} + \frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\hat{p}\right] \tag{5.2}$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{q} - \frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\hat{p}\right] \tag{5.3}$$

auch so geschrieben werden

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1/2)\,, \tag{5.4}$$

wobei die Vertauschungsrelation

$$\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = \hat{1} \tag{5.5}$$

benutzt wurde. Die Vertauschungsrelation beweist man durch Einsetzen der Definitionen (5.2), (5.3) unter Berücksichtigung der kanonischen Vertauschungsrelation für Ort und Impuls, Gl. (3.6).

5.2 Spektrum

Die potentielle Energie des harmonischen Oszillators wächst für $x \to \pm\infty$ über alle Grenzen, das heißt es können nur gebundene Zustände als Lösungen der stationären Schrödingergleichung erwartet werden. Da das Spektrum in jedem Fall diskret ist, lassen sich die Eigenfunktionen, bezeichnet $\varphi_n(x)$ (Ortsdarstellung) bzw. $\tilde{\varphi}_n(k)$ (Impulsdarstellung) sicherlich abzählen, $n = 0, 1, 2, \ldots$.

Motiviert durch die Vereinfachung, die die Hüte für die Operatoren gebracht haben, führen wir konsequenterweise auch eine abstrakte Schreibweise für die (noch zu bestimmenden) Funktionen $\varphi_n(x)$ bzw. ihre Fouriertransformierten $\tilde{\varphi}_n(k)$ ein: Wir nennen Sie einfach $|n\rangle$, wobei die Notation uns daran erinnern soll, dass $|n\rangle$ keine Zahl, sondern einen Vektor des Hilbertraums benennt – eben den $n$ten Eigenvektor des Hamiltonoperators.

Die Aussage, dass das Energiespektrum diskret, und die gesuchten Eigenvektoren $|n\rangle$ abzählbar sind, gilt natürlich für alle Potentiale, die für $x \to \pm\infty$ über alle Grenzen wachsen. Das Besondere am Spektrum des harmonischen Oszillators ist, daß seine Energieeigenwerte äquidistant sind, $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, $n = 0, 1, 2, \ldots$. Es gilt nämlich der wichtige

Satz (Harmonischer Oszillator) Die Eigenwerte des Operators $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ sind die nicht-negativen ganzen Zahlen,

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle\,, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots\,. \tag{5.6}$$

Die Leiteroperatoren wirken gemäß

$$\begin{aligned} \hat{a}|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle\,, & (5.7)\\ \hat{a}^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle\,. & (5.8) \end{aligned}$$

Beweis: Zunächst ist klar, daß die Eigenwerte λ reell sind, denn $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ ist selbstadjungiert. Ausserdem sind die Eigenwerte nicht-negativ, denn aus $\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \lambda|n\rangle$ folgt $\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \lambda\langle n|n\rangle$, und da hier die linke Seite leicht als Normquadrat des Vektors $\hat{a}|n\rangle$ erkannt wird – in jedem Fall also nicht-negativ – muß auch die rechte Seite, insbesondere der Eigenwert λ nicht-negativ sein. Um abschließend zu zeigen, daß für die Werte von λ nur die natürlichen Zahlen, einschließlich 0, in Frage kommen, benutzen wir die Vertauschungrelation (5.5) um zu beweisen $\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}|n\rangle = (\lambda-1)\hat{a}|n\rangle$ – das heisst mit $|n\rangle$ ist auch $\hat{a}|n\rangle$ Eigenvektor von $\hat{a}^\dagger\hat{a}$, und zwar zum Eigenwert $\lambda-1$. Wiederholtes Anwenden von $\hat{a}$ ergibt Eigenvektoren $\hat{a}^2|n\rangle$, $\hat{a}^3|n\rangle$ usw. zu Eigenwerten $\lambda-2$, $\lambda-3$ und so weiter. Diese Folge muß aber abbrechen, um nicht in Konflikt mit der Nicht-Negativität der Eigenwerte zu gelangen, d.h. es muss einen Vektor $|0\rangle$ geben mit der Eigenschaft $\hat{a}|0\rangle = 0$. Multiplikation mit $\hat{a}^\dagger$ ergibt $\hat{a}^\dagger\hat{a}|0\rangle = 0$, d.h. 0 ist der kleinste Eigenwert von $\hat{a}^\dagger\hat{a}$. Geht man nun die Leiter aufwärts, statt wie bisher abwärts, so erkennt man leicht, daß mit $|0\rangle$ auch $\hat{a}^\dagger|0\rangle$, $\hat{a}^{\dagger^2}|0\rangle$ usw. Eigenvektoren von $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ sind, und zwar zum Eigenwert 1, 2 und so weiter . Damit ist (5.6) und die Proportionalität $\hat{a}|n\rangle \propto |n-1\rangle$ bzw. $\hat{a}^\dagger|n\rangle \propto |n+1\rangle$ schon bewiesen. Um die Proportionalitätskonstanten $\sqrt{n}$ bzw. $\sqrt{n+1}$ zu bestäteigen betrachte man einfach die Normquadrate der zuletzt genannten Gleichungen, und wähle die zunächst unbestimten Phasen konventionsgemäss gleich null.

Die Operatoren $\hat{a}^\dagger$, $\hat{a}$ heissen sinnfälligerweise *Auf*- und *Absteigeoperator*. Angelsachsen nennen sie martialisch *Erzeugungs*- und *Vernichtungsoperator* (engl. "creation and annihilation operator"). Sie erzeugen respektive vernichten Schwingungsquanten.

Um die Ortswellenfunktion des Grundzustandes zu bestimmen, werten wir die Bestimmungsgleichung des Grundzustandes, $\hat{a}|0\rangle = 0$ in der Orstdarstellung aus. Unter Berücksichtigung der Regeln aus Abschn. **??** erhalten wir die lineare Differentialgleichung

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{m\omega}{\hbar}x + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right]\varphi_0(x) = 0 \tag{5.9}$$

bzw. $\frac{m\omega}{\hbar}xdx + d\varphi_0/\varphi_0 = 0$. Die Lösung ist eine Gaussfunktion,

$$\left[\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right]^{\frac{1}{4}} \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\} , \tag{5.10}$$

wobei der Vorfaktor (Normierungskonstante) die Normierung $\int dx|\varphi_0|^2 = 1$ garantiert. Nach Bsp. **??** ist auch die Impulsdarstellung eine Gaussfunktion, und nach () handelt es sich beim Grundzustand des harmonischen Oszillators um einen Zustand minimaler Unschärfe.

Einen Ausdruck für die Ortsdarstellung des n-ten angeregten Zustandes, $\varphi_n(x) \equiv \langle x|n\rangle$ erhält man nach Gl. (5.8) durch wiederholtes Anwenden des Erzeugers $\hat{a}^\dagger$,

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{a}^{\dagger^n}\varphi_0(x) , \tag{5.11}$$

wobei in der Ortsdarstellung $\hat{a}^\dagger$ ein Differentialoperator erster Ordnung, $\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{b} - b\frac{d}{dx}\right)$. Hier

Offensichtlich ist die Wellenfunktion des $n$ten angeregten Zustands das Produkt aus einem Polynom $n$ter Ordnung, sog *Hermitepolynom*, und einer Gaussfunktion,

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} b}} H_n(x/b) e^{-(x/b)^2/2} . \tag{5.12}$$

worin

$$b = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} . \tag{5.13}$$

die charakteristische Längenskala des HO.

Funktionen der Gestalt fallen in die wichtige Klasse der parabolischen Zylinderfunktionen. Allgemein handelt es sich dabei um Lösungen der Gleichung $\psi'' + (ax^2 + bx + c)\psi = 0$.

Die hier eingeführen Hermitepolynome H_n können aus () abgelesen werden,

$$H_n(y) = e^{y^2/2} \left(y - \frac{d}{dy} \right)^n e^{-y^2/2} . \tag{5.14}$$

Alternativ, mittels sog *Rodriguezformel*,

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \tag{5.15}$$

bewiesen über (5.14)$= e^{y^2} \left[e^{-y^2/2} \left(y - \frac{d}{dy} \right) e^{y/2} \right]^n e^{-y^2}$ und Beachtung der Produktregel $e^{-y^2/2} \left(y - \frac{d}{dy} \right) e^{y/2} f(y) = f'(y)$.

Die niedrigsten Hermitepolynome lesen sich

$$\begin{array}{ll} H_0(y) = 1 & H_1(y) = 2y \\ H_2(y) = 4y^2 - 2 & H_3(y) = 8y^3 - 12y \\ H_4(y) = 16y^4 - 48y^2 + 12 & H_5(y) = 32y^5 - 160y^3 + 120y \end{array} \tag{5.16}$$