## IV.2.2 Algebraische Lösung

Dem Potential (IV.31) entspricht der Hamilton-Operator

$$\boxed{\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2.} \tag{IV.46}$$

Ausgehend von dieser Form und vom fundamentalen Kommutator $[\hat{x}, \hat{p}] = \mathrm{i}\hbar\mathbb{1}_{\mathscr{H}}$ kann man die Energieniveaus $E_n$, d.h. die Eigenwerte von $\hat{H}$, und die zugehörigen Eigenvektoren bestimmen.

### IV.2.2 a Leiteroperatoren

Um das Problem zu umformulieren, führt man die (dimensionslosen) Operatoren

$$\boxed{\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,\hat{p}} \tag{IV.47a}$$

und sein hermitesch Konjugierte

$$\boxed{\hat{a}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} - \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,\hat{p}} \tag{IV.47b}$$

ein. Aus Gründen, die später erklärt werden, heißen diese Operatoren kollektiv *Leiteroperatoren*.

**Bemerkung:** Offensichtlich sind $\hat{a}$ und $\hat{a}^\dagger$ nicht hermitesch, d.h. sie sind nicht Observablen.

Die Definitionen (IV.47) können invertiert werden, um $\hat{x}$ und $\hat{p}$ durch $\hat{a}$ und $\hat{a}^\dagger$ auszudrücken:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \tag{IV.48a}$$

$$\hat{p} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,\frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{\mathrm{i}}. \tag{IV.48b}$$

Für später wird es nützlich sein, die Vertauschungsrelationen der Operatoren (IV.47) zu kennen. Natürlich gilt einerseits

$$\boxed{[\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = \hat{0}} \tag{IV.49a}$$

wobei $\hat{0}$ den Null-Operator bezeichnet. Dann findet man

$$\boxed{[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}}.} \tag{IV.49b}$$

Unter Nutzung der Linearität des Kommutators kommt mit den Definitionen von $\hat{a}$ und $\hat{a}^\dagger$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,\hat{p}\ ,\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} - \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,\hat{p}\right] = -\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}[\hat{x}, \hat{p}] + \frac{\mathrm{i}}{2\hbar}[\hat{p}, \hat{x}] = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\hat{x}, \hat{p}].$$

Der fundamentale Kommutator $[\hat{x}, \hat{p}] = \mathrm{i}\hbar\mathbb{1}_{\mathscr{H}}$ liefert das gesuchte Ergebnis. □

### IV.2.2 b Der Operator $\hat{N}$

Ausgedrückt durch die Operatoren $\hat{a}$ und $\hat{a}^\dagger$ nimmt der Hamilton-Operator (IV.46) die einfache Form

$$\boxed{\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}}\right)} \tag{IV.50}$$

an. Dies lässt sich noch als

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}}\right) \tag{IV.51}$$

schreiben, wobei der Operator $\hat{N}$ gemäß

$$\boxed{\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}} \tag{IV.52}$$

definiert ist. Da $(\hat{a}^\dagger\hat{a})^\dagger = \hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger)^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ ist $\hat{N}$ hermitesch, so dass dessen Eigenwerte reell sind. Bevor wir diese Eigenwerte suchen, können wir noch die Kommutatoren

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a} \tag{IV.53a}$$

und

$$[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \tag{IV.53b}$$

bestimmen.

Es gelten nämlich einerseits

$$[\hat{N}, \hat{a}] = \hat{N}\hat{a} - \hat{a}\hat{N} = (\hat{a}^\dagger\hat{a})\hat{a} - \hat{a}(\hat{a}^\dagger\hat{a}) = (\hat{a}^\dagger\hat{a})\hat{a} - (\hat{a}\hat{a}^\dagger)\hat{a} = -[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]\hat{a},$$

woraus Gl. (IV.53a) unter Nutzung der Vertauschungsrelation (IV.49b) folgt, und andererseits

$$[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{N}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{N} = (\hat{a}^\dagger\hat{a})\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger\hat{a}) = \hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger\hat{a}) - \hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger\hat{a}) = \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}^\dagger],$$

was den Kommutator (IV.53b) ergibt. □

#### IV.2.2 c Bestimmung der Eigenelemente des Hamilton-Operators

Da die Operatoren $\hat{N}$ und $\hat{H}$ offensichtlich miteinander kommutieren, s. Gl. (IV.51) haben sie die gleichen Eigenvektoren. Sei $|\lambda\rangle$ ein solcher Eigenvektor, Eigenket von $\hat{N}$ mit dem Eigenwert $\lambda$

$$\hat{N}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle, \tag{IV.54}$$

und demzufolge Eigenket von $\hat{H}$ mit dem Eigenwert $\hbar\omega(\lambda + \frac{1}{2})$:

$$\hat{H}|\lambda\rangle = \left(\lambda + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|\lambda\rangle. \tag{IV.55}$$

Da $\hat{N}$ hermitesch ist, ist $\lambda$ reell. Dazu kann man zeigen, dass es nicht-negativ sein muss. Berechnet nämlich das Matrixelement $\langle\lambda|\hat{N}|\lambda\rangle$, so gilt einerseits

$$\langle\lambda|\hat{N}|\lambda\rangle = \lambda\langle\lambda|\lambda\rangle = \lambda,$$

und andererseits, unter Nutzung der Definition des Operators $\hat{N}$

$$\langle\lambda|\hat{N}|\lambda\rangle = \langle\lambda|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\lambda\rangle = \big\|\hat{a}|\lambda\rangle\big\|^2 \geq 0,$$

wobei $\big\|\hat{a}|\lambda\rangle\big\|$ die Norm von $\hat{a}|\lambda\rangle$ bezeichnet. Aus beiden Gleichungen folgt, dass $\lambda$ nicht-negativ ist. Genauer gilt

$$\lambda > 0 \qquad \text{oder} \qquad \lambda = 0 \;\text{ und }\; \hat{a}|\lambda\rangle = |\varnothing\rangle. \tag{IV.56}$$

Als nächstes kann man die Wirkung von $\hat{N}$ auf den Vektor $\hat{a}|\lambda\rangle$ berechnen:

$$\hat{N}\hat{a}|\lambda\rangle = \big([\hat{N}, \hat{a}] + \hat{a}\hat{N}\big)|\lambda\rangle.$$

Aus dem Kommutator (IV.53a) folgt $[\hat{N}, \hat{a}]|\lambda\rangle = -\hat{a}|\lambda\rangle$, während Gl. (IV.54) zu $\hat{a}\hat{N}|\lambda\rangle = \lambda\hat{a}|\lambda\rangle$ führt. Daher gilt

$$\hat{N}\hat{a}|\lambda\rangle = (\lambda - 1)\hat{a}|\lambda\rangle, \tag{IV.57a}$$

d.h. $\hat{a}|\lambda\rangle$ ist Eigenvektor von $\hat{N}$ mit dem Eigenwert $\lambda - 1$, sofern $\hat{a}|\lambda\rangle$ nicht der Nullvektor $|\varnothing\rangle$ ist.

Rekursiv findet man[20]

$$\hat{N}\hat{a}^k|\lambda\rangle = (\lambda-k)\hat{a}^k|\lambda\rangle \quad \forall k \in \mathbb{N}, \tag{IV.57b}$$

d.h. $\hat{a}^k|\lambda\rangle$ ist Eigenvektor von $\hat{N}$ mit dem Eigenwert $\lambda-k$, vorausgesetzt $\hat{a}^k|\lambda\rangle \neq |\varnothing\rangle$.

Nun darf $\lambda-k$ nicht für alle Werte von $k \in \mathbb{N}$ Eigenwert sein: irgendwann wird $\lambda-k$ negativ, im Widerspruch zur gefundenen Nicht-Negativität der Eigenwerte. Daher muss $\lambda$ eine natürliche Zahl $n$ sein:

$$\hat{N}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \qquad \Longrightarrow \qquad \lambda = n \in \mathbb{N}.$$

Dann gilt $\lambda - n = 0$, d.h. $\hat{a}^n|\lambda = n\rangle$ ist Eigenket von $\hat{N}$ mit dem Eigenwert 0. Dies entspricht dem zweiten Fall in Gl. (IV.56), so dass $\hat{a}\hat{a}^n|\lambda=n\rangle = \hat{a}^{n+1}|\lambda=n\rangle$ der Nullvektor ist. Allgemeiner definieren die $\hat{a}^{n+k}|\lambda=n\rangle$ mit $k \in \mathbb{N}^*$ keinen neuen Eigenvektor, weil sie alle gleich $|\varnothing\rangle$ sind.

Betrachte man jetzt $\hat{N}\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle$, so gilt

$$\hat{N}\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle = [\hat{N},\hat{a}^\dagger]|\lambda\rangle + \hat{a}^\dagger\hat{N}|\lambda\rangle = \hat{a}^\dagger|\lambda\rangle + \lambda\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle,$$

d.h.

$$\hat{N}\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle = (\lambda+1)\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle, \tag{IV.58a}$$

was bedeutet, dass $\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle$ Eigenvektor von $\hat{N}$ mit dem Eigenwert $\lambda+1$ ist. Wiederum wird $(\hat{a}^\dagger)^2|\lambda\rangle$ Eigenvektor mit dem Eigenwert $\lambda+2$ sein, und allgemeiner

$$\hat{N}(\hat{a}^\dagger)^k|\lambda\rangle = (\lambda+k)(\hat{a}^\dagger)^k|\lambda\rangle \quad \forall k \in \mathbb{N}. \tag{IV.58b}$$

Da $\lambda$ eine natürliche Zahl $n$ ist, werden alle $n+k$ Eigenwerte von $\hat{N}$ sein. Somit sind die Eigenwerte von $\hat{N}$ genau die natürlichen Zahlen $n \in \mathbb{N}$. Die zugehörigen auf 1 normierten Eigenkets[21] werden ab jetzt mit $\{|n\rangle\}$ bezeichnet:

$$\boxed{\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \quad \text{mit} \quad n \in \mathbb{N}.} \tag{IV.59a}$$

Laut Gl. (IV.55) sind das auch die Eigenvektoren des Hamilton-Operators $\hat{H}$

$$\boxed{\hat{H}|n\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle \equiv E_n|n\rangle \quad \text{mit} \quad n \in \mathbb{N}.} \tag{IV.59b}$$

Natürlich findet man die gleichen Energie-Eigenwerte (IV.37a) wie in der analytischen Methode.

Insbesondere existiert ein Eigenvektor $|0\rangle$ zum Eigenwert 0: $\hat{N}|0\rangle = 0|0\rangle = |\varnothing\rangle$, der laut Gl. (IV.56) auch dadurch charakterisiert ist, dass er im Kern des Operators $\hat{a}$ ist:

$$\boxed{\hat{a}|0\rangle = |\varnothing\rangle.} \tag{IV.60}$$

Laut Gl. (IV.59b) ist $|0\rangle$ der Eigenvektor von $\hat{H}$ mit der kleinsten Energie $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$: $|0\rangle$ ist der *Grundzustand* des harmonischen Oszillators.

**Bemerkung:** Der Grundzustand $|0\rangle$ und der Null-Vektor $|\varnothing\rangle$ müssen nicht verwechselt werden! Der erstere ist auf 1 normiert, $\langle 0|0\rangle = 1$, der andere ist der einzige Vektor mit verschwindender Norm, $\langle\varnothing|\varnothing\rangle = 0$.

Laut Gl. (IV.58b) mit $\lambda = 0$ und $k = n$ ist $(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$ Eigenvektor von $\hat{N}$ mit dem Eigenwert $n$, d.h. proportional zu $|n\rangle$:

$$|n\rangle = C_n(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \quad \text{mit} \quad C_n \in \mathbb{R}^*\ ,\ n \in \mathbb{N}$$

---

[20] Mit $\hat{N}\hat{a}^{k+1}|\lambda\rangle = (\hat{N}\hat{a})\hat{a}^k|\lambda\rangle = \big(\hat{a}\hat{N}+[\hat{N},\hat{a}]\big)\hat{a}^k|\lambda\rangle = \big[(\lambda-k)\hat{a}-\hat{a}\big]\hat{a}^k|\lambda\rangle = (\lambda-k-1)\hat{a}^k|\lambda\rangle$.

[21] ..., die wie immer nur bis auf einen Phasenfaktor $e^{i\delta}$ eindeutig sind.

mit offensichtlich $C_0 = 1$ für den Fall $n = 0$. Daraus folgt sofort

$$|n\rangle = C_n \hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger)^{n-1} |0\rangle = \frac{C_n}{C_{n-1}} \hat{a}^\dagger |n-1\rangle \quad \text{für } n \in \mathbb{N}^*.$$

Da $|n\rangle$ und $|n-1\rangle$ definitionsgemäß auf 1 normiert sind, gilt

$$1 = \langle n|n\rangle = \left|\frac{C_n}{C_{n-1}}\right|^2 \langle n-1|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n-1\rangle.$$

Unter Nutzung von $\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{N} + \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}}$ kommt

$$\langle n-1|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n-1\rangle = \langle n-1|\hat{N}|n-1\rangle + \langle n-1|\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}}|n-1\rangle = [(n-1)+1]\langle n-1|n-1\rangle = n$$

und daher

$$1 = \langle n|n\rangle = \left|\frac{C_n}{C_{n-1}}\right|^2 n \qquad \Leftrightarrow \qquad |C_n| = \frac{|C_{n-1}|}{\sqrt{n}}.$$

Daraus folgt rekursiv $|C_n| = |C_0|/\sqrt{n!} = 1/\sqrt{n!}$. Indem man $C_n$ reell positiv wählt, gilt schließlich

$$\boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle.} \tag{IV.61}$$

Aus dieser Formel folgert man sofort

$$\boxed{\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \quad \forall n \in \mathbb{N}} \tag{IV.62a}$$

und, unter Nutzung der Vertauschungsrelation (IV.49b)

$$\boxed{\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \quad \forall n \in \mathbb{N}^*.} \tag{IV.62b}$$

Mit $\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{N} + \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}}$ (s. oben) gilt

$$\hat{a}|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}\hat{a}^\dagger \frac{(\hat{a}^\dagger)^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} (\hat{N} + \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}}) |n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} (n-1+1)|n-1\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle. \ \square$$

Da der Operator $\hat{a}^\dagger$ bzw. $\hat{a}$ aus dem $n$-ten auf das $(n+1)$-te bzw. $(n-1)$-te Energieniveau führt, wird $\hat{a}^\dagger$ *Aufsteige-* oder *Erzeugungsoperator* und $\hat{a}^\dagger$ *Absteige-* oder *Vernichtungsoperator* genannt.[22] Die Eigenschaften (IV.62) rechtfertigen auch die gemeinsame Bezeichnung *Leiteroperatoren*, wenn man sich die sukzessiven äquidistanten Energieniveaus als Leiterstufen vorstellt.

#### IV.2.2 d Wellenfunktionen in Ortsdarstellung

Schließlich kann man anhand der Ergebnisse des letzten Paragraphen die Wellenfunktionen in Ortsdarstellung (IV.37b) wieder finden.

Dafür kann man zuerst in der charakteristischen Eigenschaft (IV.60) des Grundzustands den Absteigeoperator $\hat{a}$ durch die Orts- und Impulsoperatoren ausdrücken:

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right)|0\rangle = |\varnothing\rangle, \tag{IV.63}$$

wobei die Definition (IV.47a) benutzt wurde. Das Produkt mit $\langle x|$ liefert dann unter Berücksichtigung der Korrespondenzen (III.13) und (III.16) die zugehörige Ortsdarstellung

$$\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\, x\psi_0(x) + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi_0(x) = 0 \quad \text{mit} \quad \psi_0(x) \equiv \langle x|0\rangle.$$

[22] Vgl. auch die Operatoren $\hat{S}^+$ und $\hat{S}^-$ des Spin-$\frac{1}{2}$-Systems im § II.3.2 e.

Nach trivialer Umschreibung ergibt sich

$$\frac{\mathrm{d}\psi_0(x)}{\mathrm{d}x} + \frac{m\omega}{\hbar} x\psi_0(x) = 0, \tag{IV.64}$$

d.h. eine Differentialgleichung erster Ordnung mit allgemeiner Lösung $C\,\mathrm{e}^{-m\omega x^2/2\hbar}$ mit $C \in \mathbb{C}$. Die (bis auf einen Phasenfaktor) einzige Lösung, deren Betragsquadrat auf 1 normiert ist, ist

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{-m\omega x^2/2\hbar}. \tag{IV.65}$$

Diese Funktion stimmt mit der Wellenfunktion überein, die sich aus Gl. (IV.37b) im Fall $n = 0$ ergibt.

**Bemerkung:** Eigentlich zeigt Gl. (IV.64) zwei Sachen, die in der Herleitung des § IV.2.2 c stillschweigend angenommen wurden. Erstens *existiert* $\psi_0(x)$ und damit der Grundzustand $|0\rangle$. Zweitens ist $\psi_0(x)$ und damit $|0\rangle$ „eindeutig“ festgelegt, d.h. das niedrigste Energieniveau ist nicht entartet.

Ausgehend von $\psi_0$ kann man die Wellenfunktionen in Ortsdarstellung der höheren Energieniveaus bestimmen. Die Beziehung (IV.61) zwischen $|n\rangle$ und $|0\rangle$ kann nämlich noch in der Form

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} - \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right)^n |0\rangle$$

umgeschrieben werden, d.h. in Ortsdarstellung mit $\psi_n(x) \equiv \langle x\,|n\rangle$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n \psi_0(x) \quad \text{für} \quad n \in \mathbb{N}. \tag{IV.66}$$

Man kann prüfen, dass diese Formel genau das gleiche wie Gl. (IV.37b) ergibt.