Wiederholung QM-Grundlagen

c) Operatoren

quantenmechan. Observablen $\rightarrow$ lineare Operatoren im Hilbertraum $\hat{A}$

adjungierter Operator

— adjungierter Operator

sei $\hat{A}|\psi\rangle = |\phi\rangle$ $\qquad \langle\psi|\hat{A}^+ = \langle\phi|$

$\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^*$

Def. über ~~Skalarpro~~ Matrixelement

$$\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle = \langle\hat{A}^+\psi_1|\psi_2\rangle$$

selbstadjungierter Operator: $(\hat{A}^+ = \hat{A})$

$$\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle = \langle\hat{A}\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\hat{A}\psi_1\rangle^*$$

speziell: $|\psi_2\rangle = |\psi_1\rangle$

$$\Rightarrow \underbrace{\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_1\rangle} = \langle\psi_1|\hat{A}|\psi_1\rangle^*$$

falls $\hat{A}$ selbstadjungiert

$\Rightarrow$ Erwartungswert von $\hat{A}$ im Zustand $|\psi_1\rangle$ ist reell !!

Wichtig, da Erwartungswert dem Meßergebnis entspricht

Unitärer Operator: $\hat{U}^+\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^+ = \mathbb{1}$

d) Dynamik von Quantensystemen

Zeitabhängige Schrödingergleichung (SG):

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \quad (*)$$

sei $\hat{H}$ nicht explizit zeitabhängig

Dann kann man ⊛ formal lösen durch: $|\psi(t)\rangle = \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}}|\psi(0)\rangle$

$$=: \underbrace{\hat{U}(t,0)}_{\text{Zeitentwicklungsoperator}} |\psi(0)\rangle$$

(im Falle, dass $\hat{H}$ nicht explizit zeitabhängig!)

adjungierte SG: $\langle\psi(t)|\hat{H} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\langle\psi(t)|$

Zeitunabhängige SG

$|\psi(t)\rangle = f(t)|\varphi\rangle \quad \Longrightarrow \quad \hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$

(falls $\hat{H}$ nicht explizit zeitabhängig)

Ehrenfestgleichung für Erwartungswerte

betrachte $\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle$

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle = \ldots = \langle\underbrace{[\hat{A},\hat{H}]}_{\text{Kommutator}}\rangle + \frac{\hbar}{i}\underbrace{\left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle}$$

relevant bei expliziter Zeitabhängigkeit von $\hat{A}$

Folgerung: falls $[\hat{A},\hat{H}] = 0$ und $\frac{\partial\hat{A}}{\partial t} = 0$

$\Longrightarrow$ $\hat{A}$ ist Erhaltungsgröße

Analogie zur klass. Mechanik: (Observable A) , f Freiheitsgrade

$$\frac{dA}{dt} = \{A,H\} + \frac{\partial A}{\partial t}$$
$$= \sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right) + \frac{\partial A}{\partial t}$$

Bilder in der QM

• Schrödingerbild: – Zustandsvektor zeitabhängig $|\psi(t)\rangle$

(aber Zeitabhängigkeit häufig "trivial" $\sim e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

falls $\hat{H}$ nicht explizit zeitabhängig)

– Operatoren zeitunabhängig

– Dyn. Gleichung: Schrödingergleichung

• Heisenbergbild – Operatoren zeitabhängig

Zeitentwicklungsoperator mit

$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,0)|\psi(0)\rangle$ Schrödinger (*) $t=0$

$\Leftrightarrow |\psi(0)\rangle = \hat{U}^{-1}(t,0)|\psi(t)\rangle = \hat{U}^{+}|\psi(t)\rangle$

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^{+}(t,0)\,\hat{A}_S\,\hat{U}(t,0)$$

Operator im Schrödingerbild

Erwartungswert:

$$\langle\psi(0)|\hat{A}_H(t)|\psi(0)\rangle = \langle\psi(0)|\hat{U}^{+}(t,0)\hat{A}_S\hat{U}(t,0)|\psi(0)\rangle$$

Erwartungswert im Heisenbergbild

$$= \langle\psi(t)|\hat{A}_S|\psi(t)\rangle$$

Erwartungswert im Schrödingerbild

Erwartungswert bleibt beim Bildwechsel erhalten!

Zentrale dynamische Gleichung im Heisenbergbild

(für Operatoren, da Zustände als konstant betrachtet werden)

$$\frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} = \dots = \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}_H]$$ Heisenberg'sche Bewegungsgleichung

Dirac-Bild

Sei $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1$ mit $\hat{H}^1 = \hat{H}^1(t)$ zeitabhängige Störung

$\hat{H}^0$: zeitunabhängig

Dirac-Operatoren: $\hat{A}_D(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^0 t}\, \hat{A}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^0 t}$

$$\frac{d\hat{A}_D}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_0, \hat{A}_D\right]$$

Dirac-Zustände: $|\psi_D(t)\rangle = \hat{U}_0^+(t,0)\,|\psi(t)\rangle$

Zugehörige dyn. Gl.: $i\hbar \frac{d}{dt}|\psi_D(t)\rangle = \hat{H}^1\, |\psi_D(t)\rangle$

sieht formal aus wie SG — $\hat{H}^1$: Störoperator

I. Relativistische Quantenmechanik

Bisher kennengelernt (Erinnerung..)

Nicht-relativistische QM, mit einem Hamiltonoperator $\hat{H}$, den man mit Hilfe der Korrespondenzregeln aus der klass. nichtrelativistischen Mechanik herleiten kann

Konkret für freies Teilchen (nicht-relativistisch)

$$E = E^{kin} = \frac{p^2}{2m} \qquad \text{klass., nicht-relativistisch}$$

Korrespondenzregeln: $E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$, $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi} \quad \text{mit } \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

(analog für Teilchen im Potential:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(r) \Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{V}$$

Zusammenhang mit Dispersionsrelation

benutze: $E = \hbar\omega$, $\underline{p} = \hbar\underline{k}$ (de Broglie-Relation)

Für freien, nicht-relativistisches Teilchen folgt
$E = \frac{p^2}{2m}$

$$\Rightarrow \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \omega(k)$$

$(k = |\underline{k}|)$

Warum nun relativistische QM?

→ Zentrales Ziel:

Beschreibung des Spins, Spin-Bahn-Wechselwirkung...

Dies sind (rein) relativistisch begründbare Effekte!

I.1. Klein-Gordon-Gleichung

Ausgangspunkt: Relativistische Energie-Impuls-Beziehung (freies Teilchen)

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} \quad (*)$$

mit c (Vakuum-)Lichtgeschwindigkeit, m_0 (Ruhe-)masse
und p relativistischer mechanischer Impuls $\underline{p} = \gamma m_0 \underline{v}$ – Geschwindigkeit

$$\gamma = \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}}$$

Limes $\frac{v}{c} \to 0 \Rightarrow \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \approx 1$

$\Rightarrow \underline{p} = m_0\underline{v}$ ~~für den~~ nicht-relativist. Fall

Exkurs zum Hintergrund der Gleichung (*)
Element.
Spezielle Relativitätstheorie

Vierer-Geschwindigkeit: $u^\mu = \frac{dx^\mu}{d\tau}$ mit $dx^\mu = (cdt, dx, dy, dz)$

$\mu = 0, \underbrace{1,2,3}_{\text{räuml. Komponente}}$

Zeit-Komponente

Komponente des Vierervektors u

$d\tau = \frac{1}{\gamma}\, dt$

(„Eigenzeit")

und $dx_\mu = (cdt, -dx, -dy, -dz)$

~~man findet~~

$$u^\mu = \frac{dx^\mu}{d\tau} = \frac{dx^\mu}{dt}\frac{dt}{d\tau}$$

$$= \gamma \frac{dx^\mu}{dt}$$

$$\underbrace{dx^\mu dx_\mu}_{\text{Skalarprodukt}} = c^2(dt)^2 - (dx)^2 - (dy)^2 - (dz)^2$$

$$= (ds)^2$$

differentielles Längenquadrat

$$\Rightarrow u^0 = \gamma c$$

$$u^i = \gamma v^i \quad i = 1,2,3 \quad , \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

$$u^\mu u_\mu = (\gamma c, \gamma v_x, \gamma v_y, \gamma v_z)\begin{pmatrix} \gamma c \\ -\gamma v_x \\ -\gamma v_y \\ -\gamma v_z \end{pmatrix} = \ldots = c^2$$

Vierer-Impuls

Komponente

$$p^\mu = m_0 u^\mu \quad \text{mit} \quad p^\mu p_\mu = m_0^2 c^2$$

Komponenten:

$$p^0 = m_0 \gamma c \quad \text{Zeitkomponente}$$

$$p^i = m_0 \gamma v^i \quad i = 1,2,3 \quad \text{räuml. Komponente}$$

Die Raumkomponente p^i entspricht dem relativist.-mechan. Impuls

Man kann zeigen (Herleitung über relativist. Mechanik)

$$p^0 = \frac{1}{c} E_{kin}^{rel} \quad \text{mit} \quad E_{kin}^{rel} = m_0 \gamma c^2$$

$$\Rightarrow p^\mu = \Big(\frac{1}{c}E_{kin}^{rel}, \underbrace{\overbrace{m\gamma\underline{v}}^{\underline{p}}}_{\text{räuml. Komponente}}\Big)$$

$$p^\mu p_\mu = m_0^2 c^2 = \frac{1}{c^2}\left(E_{kin}^{rel}\right)^2 - \underline{p}^2$$

$$\Rightarrow \boxed{E_{kin}^{rel} = \sqrt{c^2\underline{p}^2 + m_0^2 c^4}}$$

Grenzfälle:

- Für kleine $\frac{\underline{p}}{m_0 c}$ verhält sich $E_{kin}^{rel} \sim p^2$ "teilchenartig"
- Für große Impulse wie $E_{kin}^{rel} \sim p$. "wellenartig"

Zurück zur Herleitung der Klein-Gordon-Gleichung

$$E = \sqrt{\underline{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4} \quad (*)$$

Frage: Kann man hieraus wie im nicht-relativist. Fall eine dyn. Gleichung für die quantenmechan. Zustände herleiten?

1. Versuch

nehme (*) und ersetze $E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$, $\underline{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$

$$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \sqrt{m_0^2c^4 - \hbar^2c^2\Delta}\;\psi$$

Nicht akzeptabel, da auf der rechten Seite nicht-analyt. Funktion eines Operators auftaucht (Laplace Δ unter der Wurzel)...
(Differential-

2. Versuch

quadriere (*) zunächst und ersetze dann

$$E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4$$

jetzt: $E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$, $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$

$$\boxed{\psi = \psi(\underline{r},t)}$$

$$\Rightarrow \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)^2\psi = \left(m_0^2c^4 - \hbar^2c^2\Delta\right)\psi$$

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi = \left(-\hbar^2c^2\Delta + m_0^2c^4\right)\psi \qquad \Big| : (-\hbar^2c^2)$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta + \frac{m_0^2c^4}{\hbar^2c^2}\right)\psi(\underline{r},t) = 0$$

Benutze noch die Def. des d'Alembert-Operators

$$\Box = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$$

(Vorsicht: Vorzeichen manchmal anders)

$$\Rightarrow \boxed{\left(\Box + \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi(\underline{r},t) = 0}$$ Klein-Gordon-Gleichung