

WM: Dynamik von Quantensystemen

Ehrenfest'sches Theorem

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle \quad \left\langle A \right\rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$$

nur relevant bei explizitem
Zeitabhängigkeit von \hat{A} !!

$[\hat{H}, \hat{A}] = 0 \Rightarrow \langle \hat{A} \rangle$ Erhaltungsgröße
(falls \hat{A} nicht explizit zeitabh.)

Analogie zur Klass. Mechanik: betrachte $A(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f, t)$
Klass. Ansatz

$$\frac{dA}{dt} = \underbrace{[A, H]}_{\text{Poissonklammer}} + \frac{\partial A}{\partial t}$$

Hamiltonfunktion

Analogie $[A, H] \leftrightarrow \frac{i}{\hbar} [H, \hat{A}] = -\frac{i}{\hbar} [A, \hat{H}]$

Zeitentwicklungsgenerator

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

vorgegeben (Konstant)

führt von der Zeit t_0 zur Zeit t

BWGL: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0)$ (aus 56)

formale Lösung:

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \hat{U}(t', t_0)$$

Vereinfachung für Systeme mit $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$

$$\Rightarrow \hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t - t_0)}$$

Weitere Eigenschaften von \vec{U} .

(i) Forderung: Die Norm eines Zustands darf nicht von der Zeit abhängen!!

Grund: Norm $\hat{=}$ Integral über die Aufenthaltswahrsch. d. Zustände
 $\langle \psi | \psi \rangle = \int dx \psi^*(x,t) \psi(x,t)$
Wahrsch. bleibt erhalten!!
 \Rightarrow Norm muß erhalten bleiben

also: $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle \stackrel{!}{=} \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = \text{const.}$
benutze $|\psi(t)\rangle = \vec{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$

$$\Rightarrow \langle \psi(t_0) | \vec{U}^\dagger \vec{U} | \psi(t_0) \rangle \stackrel{!}{=} \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle$$
$$\langle \psi(t_0) | \vec{U}^\dagger \vec{U} | \psi(t_0) \rangle \stackrel{!}{=} \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle$$

fordere also: $\vec{U}^\dagger(t, t_0) \vec{U}(t, t_0) \stackrel{!}{=} \mathbb{1}$

$$\Leftrightarrow \boxed{\vec{U}^\dagger(t, t_0) \stackrel{!}{=} \vec{U}^{-1}(t, t_0)}$$

\vec{U} ist also unitäre Operator!!

speziell für System mit zeitunabh. \hat{H} folgt:

$$\begin{aligned}\hat{U}(t, t_0) &= e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t-t_0)} \\ \hat{U}^{-1} &= e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t-t_0)} = \hat{U}^\dagger \quad (\text{da } \hat{H}^\dagger = \hat{H}) \\ &= \hat{U}(t_0, t)\end{aligned}$$

(i) Es muß gelten:

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t') \hat{U}(t', t_0) \quad \text{Vorstellung: } t_0 < t' < t$$

dann

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t, t') |\psi(t')\rangle \\ &= \hat{U}(t, t') \hat{U}(t', t_0) |\psi(t_0)\rangle\end{aligned}$$

(ii) Systeme mit Zeittranslationsinvarianz

typischerweise verbunden mit
(\hat{H} Energieerhaltung, s. Noether'sche
Theoreme)

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t-t_0)$$

nur Zeitdifferenz ist wichtig !!

Das sieht man explizit bei Systemen, in denen \hat{H} zeitunabh.:

$$\hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t-t_0)}$$

V.3. Konstruktion weiterer Darstellungen („Bilder“) der Dynamik von Quantensystemen

Bisher: „Schrödinger-Bild“ der Dynamik

- Zustände $|\psi\rangle = |\psi(t)\rangle$ sind zeitabhängig
- Operatoren _____ sind zeitunabhängig
(falls die zugehörigen Observablen zeitunabhängig sind)

• BWGL: $\boxed{i\hbar |\dot{\psi}(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle}$ Schrödingergl.

Das ist nicht die einzige mögliche Darstellung!

Idee: Die physikalischen Messgröße des Systems, d.h. die Erwartungswerte, bleiben unverändert bei unitären Transformationen mit dem (zeitentwickelnd) Operator \hat{U}

sei $|\bar{\psi}\rangle = \hat{U}^\dagger |\psi\rangle$ und $\hat{A} = \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U}$
transformiere also Zustände und Operatoren!

$$\begin{aligned}
 \langle \bar{\psi} | \hat{A} | \bar{\psi} \rangle &= \langle \hat{U}^\dagger \psi | \hat{A} | \hat{U}^\dagger \psi \rangle \\
 &= \langle \psi | \hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger | \psi \rangle \\
 &= \langle \psi | \underbrace{\hat{U} \hat{U}^\dagger}_{\hat{1}} \hat{A} \underbrace{\hat{U} \hat{U}^\dagger}_{\hat{1}} | \psi \rangle \\
 &= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle
 \end{aligned}$$

Erwartungswert transf. Operatoren in transf. Zuständen!

gilt falls \vec{U} unitar,
d.h. $\vec{U}^\dagger = \vec{U}^{-1}$

durch das Zeitentwicklungs-
operator erfüllt!

V.4. Heisenberg-Bild der Dynamik

Konzept: • Zustände sind (im Unterschied zum Schrödingerbild!)
zeitunabhängig!

• Operatoren sind stets zeitabhängig!

Zustände:

$$|\psi_H(t)\rangle = |\psi_H\rangle \stackrel{!}{=} |\psi(t_0)\rangle$$

Zustand im Schrödingerbild

$$\text{benutze: } |\psi(t)\rangle = \vec{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

$$\Leftrightarrow |\psi(t_0)\rangle = \vec{U}^{-1} |\psi(t)\rangle$$

(Schrödingerbild)

$$\Rightarrow |\psi_H\rangle = \vec{U}^{-1}(t, t_0) |\psi(t)\rangle \\ = \vec{U}^\dagger(t, t_0) |\psi(t)\rangle \quad (1)$$

Definition der zeitabhängigen Operatoren:

$$\hat{A}_H(t) = \vec{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A} \vec{U}(t, t_0) \quad (2)$$

↳ Operator im Schrödingerbild

Damit:

Erwartungswert im Heisenbergbild:

$$\langle \psi_H | \hat{A}_H(t) | \psi_H \rangle = \textcircled{1} \langle \vec{u}^\dagger \psi(t) | \hat{A}_H(t) | \vec{u}^\dagger \psi(t) \rangle$$

$$= \langle \psi(t) | \vec{u} \hat{A}_H(t) \vec{u}^\dagger | \psi(t) \rangle$$

$$\stackrel{\textcircled{2}}{=} \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$$

Erwartungswert im Schrödingerbild!

BWGL für die Operatoren im Heisenbergbild

(Zustände sind ja konstant!)

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = \frac{d}{dt} (\vec{u}^\dagger(t, t_0) \hat{A} \vec{u}(t, t_0))$$

Produktregel

$$= \frac{\partial \vec{u}^\dagger}{\partial t} \hat{A} \vec{u}(t, t_0)$$

$$+ \vec{u}^\dagger \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \vec{u} + \vec{u}^\dagger \hat{A} \frac{\partial \vec{u}}{\partial t}(t, t_0)$$

benutze BWGL für \vec{u} (Vop. V.2):

$$i\hbar \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = \hat{H} \vec{u} \Leftrightarrow \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \vec{u}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \vec{u}^\dagger}{\partial t} = \left(\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \vec{u} \right)^\dagger \\ = -\frac{1}{i\hbar} \vec{u}^\dagger \hat{H}$$

Einsetzen

$$\hat{H}^\dagger = \hat{H}!$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) &= -\frac{1}{i\hbar} \vec{u}^\dagger \hat{H} \hat{A} \vec{u} + \vec{u}^\dagger \frac{\partial A}{\partial t} \vec{u} \\ &\quad + \frac{1}{i\hbar} \vec{u}^\dagger \hat{A} \hat{H} \vec{u} \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \vec{u}^\dagger \hat{H} \underbrace{\vec{u} \vec{u}^\dagger}_{\uparrow} \hat{A} \vec{u} + \frac{1}{i\hbar} \vec{u}^\dagger \hat{A} \underbrace{\vec{u} \vec{u}^\dagger}_{\uparrow} \hat{H} \vec{u} \\ &\quad + \vec{u}^\dagger \frac{\partial A}{\partial t} \vec{u} \end{aligned}$$

benutze: $\vec{u}^\dagger \hat{H} \vec{u} = \hat{H}_H(t)$

$\vec{u}^\dagger \hat{A} \vec{u} = \hat{A}_H(t)$

und definiere: $\vec{u}^\dagger \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \vec{u} =: \frac{\partial \hat{A}_H(t)}{\partial t}$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)] + \frac{\partial \hat{A}_H(t)}{\partial t}} \quad (*)$$

"ersetzt" die Schrödinger-Gleichung im Schrödinger-Bild

Bemerkung:

i) System mit zeitunabhängigem \hat{H}

$$\vec{u}(t, t_0) = \vec{u}(t - t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t - t_0)}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \hat{H}_H(t) &= \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} \\
&= e^{i/\hbar \hat{H}(t-t_0)} \hat{H} e^{-i/\hbar \hat{H}(t-t_0)} \\
&= \hat{H} e^{i/\hbar \hat{H}(t-t_0)} e^{-i/\hbar \hat{H}(t-t_0)} = \hat{H} \quad ? \\
&= \hat{H} \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{denn! } [\hat{H}, \hat{U}] = [\hat{U}, \hat{H}] \\ = 0 \end{array} \right. \\
&\quad \left(\begin{array}{l} \text{Hamiltonoperatoren im Schrödingerbild} \end{array} \right)
\end{aligned}$$

(i) Vergleich mit dem Ehrenfest'sche Theorem

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

gilt genau so auch im Heisenbergbild,

da der Erwartungswert ja erhalten bleibt bei der unitären Transformation
Schrödinger \rightarrow Heisenberg!

Beweis im Heisenbergbild.

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H, \hat{H}_H] + \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_H(t)$$

$$\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_H, \hat{A}_H]$$

sieht völlig analog aus, aber es geht nicht um Erwartungswerte!

(ii) Falls $[\hat{A}_H, \hat{H}_H] = 0$ und $\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_H = 0$

$\Rightarrow \hat{A}_H$ bleibt erhalten

IV.5. Dirac-Bild (Wechselwirkungsbild) der Dynamik

steht „zwischen“ dem Schrödinger- und dem Heisenbergbild,
da sowohl Zustände als auch Operatoren zeitabhängig sind!

Besonders geeignet für System mit Hamiltonoperator

$$\hat{H}(\epsilon) = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(\epsilon)$$

zeitunabh.

zeitabh. Anteil

z.B. Kopplung an ^{zeitl.} oszillierendes
elekt. Feld oder magnet. Feld

„Wechselwirkung mit Umgebung“

Häufig ist \hat{H}_1 klein und kann als „Störung“ betrachtet werden

\Rightarrow Dirac-Bild zur Konstruktion einer
zeitabh. Störungstheorie!

Operatoren im Dirac-Bild

$$\hat{A}_D(t) = \hat{U}_0^\dagger(t, t_0) \hat{A} \hat{U}_0(t, t_0)$$

Zeitentwicklungsoperator
im Schrödingerbild zum
(zeitunabh.) Hamiltonian \hat{H}_0 !

$$\begin{aligned} \Rightarrow \hat{U}_0(t, t_0) &= \hat{U}(t - t_0) \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t - t_0)} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \hat{A}_D(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t - t_0)} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t - t_0)}$$

BWGL:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{A}_D(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 \hat{A}_D(t) + \underbrace{\hat{U}_0^\dagger \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \hat{U}_0}_{=: \frac{\partial \hat{A}_D(t)}{\partial t}} + \underbrace{(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0^\dagger \hat{U}_0^\dagger + \hat{A} \hat{H}_0 \hat{U}_0)}_{\hat{U}_0^\dagger \hat{A} \hat{U}_0 \hat{H}_0 - \hat{A}_D \hat{H}_0} \hat{U}_0 \\ &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{A}_D(t)] + \frac{\partial \hat{A}_D(t)}{\partial t} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{d\hat{A}_D(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{A}_D(t)] + \frac{\partial \hat{A}_D(t)}{\partial t} \\ &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_D(t), \hat{H}_0] + \frac{\partial \hat{A}_D(t)}{\partial t} \end{aligned}$$

Dynamik der Operatoren im Dirac-Bild

Sei ist durch \hat{H}_0 bestimmt !

Zeitunabh. Anteil des vollen Hamiltonians!
 $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$

Zustände im Dirac-Bild

definiere: $|\psi_D(t)\rangle = \hat{U}_0(t_0, t) |\psi(t)\rangle$

$$\hat{U}_0 = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)}$$

$$= \hat{U}_0^\dagger(t, t_0) |\psi(t)\rangle$$

Zustand im Schrödinger-Bild !!

Zeitentwicklung:

$$|\dot{\psi}_D(t)\rangle = \frac{\partial}{\partial t} (\hat{U}_0(t_0, t) |\psi(t)\rangle)$$

Produktregel

$$= \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_0(t_0, t) \right) |\psi(t)\rangle + \hat{U}_0(t_0, t) \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle$$

benutze: $\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_0(t_0, t) = \frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 \hat{U}_0(t_0, t)$

und $\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle$

SG

Zustand im Schrödinger-Bild

Voller Hamiltonian !!

Einsetzen:

$$|\dot{\Psi}_D(\epsilon)\rangle = \frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 \underbrace{\hat{U}_0(\epsilon, \epsilon)}_{\hat{U}_0^+(\epsilon, \epsilon)} |\Psi(\epsilon)\rangle - \underbrace{\hat{U}_0(\epsilon, \epsilon)}_{\hat{U}_0^+(\epsilon, \epsilon)} \frac{i}{\hbar} \hat{H} |\Psi(\epsilon)\rangle$$

vertausche
↔

$$\Rightarrow i\hbar |\dot{\Psi}_D(\epsilon)\rangle = (-\hat{H}_0 \hat{U}_0^+ + \hat{U}_0^+ \hat{H}) |\Psi(\epsilon)\rangle$$

$$= (-\hat{U}_0^+ \hat{H}_0 + \hat{U}_0^+ \hat{H}) |\Psi(\epsilon)\rangle$$

benutze noch: $|\Psi(\epsilon)\rangle = \left(\hat{U}_0(\epsilon, \epsilon)\right)^{-1} |\Psi_D(\epsilon)\rangle$
(Def. des Dirac-Zustands)

$$= \hat{U}_0(\epsilon, \epsilon) |\Psi_D(\epsilon)\rangle$$

$$i\hbar |\dot{\Psi}_D(\epsilon)\rangle = \underbrace{(-\hat{U}_0^+ \hat{H}_0 \hat{U}_0 + \hat{U}_0^+ \hat{H} \hat{U}_0)}_{\hat{U}_0^+ (-\hat{H}_0 + \hat{H}) \hat{U}_0} |\Psi_D(\epsilon)\rangle$$

$$\hat{H}_1(\epsilon)$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar |\dot{\Psi}_D(\epsilon)\rangle = \hat{H}_{1,D}(\epsilon) |\Psi_D(\epsilon)\rangle}$$