Wh: Dynamik von Quantensysteme

Ehrenfest'sches Theorem

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{A}]\rangle + \underbrace{\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\rangle}_{\text{nur relevant bei expliziter Zeitabhängigkeit von } \hat{A}\,!!}$$

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

$[\hat{H},\hat{A}]=0 \Rightarrow \langle\hat{A}\rangle$ 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. Observable

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

Hamiltonfkt

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

Zeitentwicklungsoperator

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)\underbrace{|\psi(t_0)\rangle}_{\text{vorgegeben (Konstante)}}$$

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 SG)

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 System 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 $\hat{U}$.

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

Grund: Norm $\hat{=}$ Integral über die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ($\langle\psi|\psi\rangle = \int d\underline{r}\, \psi^*(\underline{r},t)\psi(\underline{r},t)$)

Wahrsch. bleibt erhalten!!

$\Rightarrow$ Norm muß erhalten bleiben

also: $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle \overset{!}{=} \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle = \text{const.}$

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

$$\Rightarrow \langle \hat{U}\psi(t_0)|\hat{U}\psi(t_0)\rangle \overset{!}{=} \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

$$\langle\psi(t_0)|\hat{U}^+\hat{U}|\psi(t_0)\rangle \overset{!}{=} \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

fordere also: $\hat{U}^+(t,t_0)\,\hat{U}(t,t_0) \overset{!}{=} \hat{1}$

$$\Leftrightarrow \boxed{\hat{U}^+(t,t_0) \overset{!}{=} \hat{U}^{-1}(t,t_0)}$$

$\hat{U}$ ist also unitärer Operator!

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

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

$$\hat{U}^{-1} = e^{+\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} = \hat{U}^{+} \quad (\text{da } \hat{H}^{+} \hat{=} \hat{H})$$

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

ii) Es muß gelten:

$$\hat{U}(t,t_0) = \hat{U}(t,t')\hat{U}(t',t_0)$$

Vorstellung: $t_0 < t' < t$

denn

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

iii) Systeme mit Zeittranslationsinvarianz (typischerweise verbunden mit $\hat{=}$ 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 den $\hat{H}$ 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 einzig mögliche Darstellung!

Idee: Die physikalischen Meßgröße des Systems, d.h. die Erwartungswerte, bleiben ungeändert bei unitärer Transformation mit dem (Zeitentwicklungs) Operator $\hat{U}$

sei $|\bar{\psi}\rangle = \hat{U}^+ |\psi\rangle$ und $\hat{\bar{A}} = \hat{U}^+ \hat{A}\, \hat{U}$

transformiere also Zustände und Operatoren!

$$\langle \bar{\psi} | \hat{\bar{A}} | \bar{\psi}\rangle = \langle \hat{U}^+\psi | \hat{\bar{A}} | \hat{U}^+\psi\rangle$$

Erwartungswert transf. Operator in transf. Zuständen!

$$= \langle \psi | \hat{U}\, \hat{\bar{A}}\, \hat{U}^+ | \psi\rangle$$

$$= \langle \psi | \underbrace{\hat{U}\hat{U}^+}_{1} \hat{A}\, \underbrace{\hat{U}\hat{U}^+}_{1} | \psi\rangle$$

$$\overset{!}{=} \langle \psi | \hat{A} | \psi\rangle$$

gilt falls $\hat{U}$ unitär,
d.h. $\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$

durch den Zeitentwicklungsoperator 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

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

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

(Schrödingerbild

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

Definition der zeitabhängigen Operatoren:

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

Operator im Schrödingerbild

Damit:

Erwartungswert im Heisenbergbild:

$$\langle \psi_H | \hat{A}_H(t) | \psi_H \rangle \overset{①}{=} \langle \hat{U}^+ \psi(t) | \hat{A}_H(t) | \hat{U}^+ \psi(t) \rangle$$

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

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

Erwartungswert im Schrödingerbild!

BWGL für die Operatoren im Heisenbergbild
(Zustände sind ja konstant!)

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = \frac{d}{dt}\left(\hat{U}^+(t,t_0)\, \hat{A}\, \hat{U}(t,t_0) \right)$$

Produktregel

$$= \frac{\partial \hat{U}^+}{\partial t} \hat{A}\, \hat{U}(t,t_0)$$

$$+ \hat{U}^+ \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \hat{U} + \hat{U}^+ \hat{A} \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t,t_0)$$

benutze BWGL für $\hat{U}$ (Kap. V.2):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U} = \hat{H} \hat{U} \iff \frac{\partial}{\partial t} \hat{U} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \hat{U}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}^+ = \left(\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \hat{U} \right)^+$$

$$= -\frac{1}{i\hbar} \hat{U}^+ \hat{H}$$

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

Einsetzen

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = -\frac{1}{i\hbar}\hat{U}^+\hat{H}\hat{A}\hat{U} + \hat{U}^+\frac{\partial A}{\partial t}\hat{U} + \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^+\hat{A}\hat{H}\hat{U}$$

$$= -\frac{1}{i\hbar}\hat{U}^+\hat{H}\,\overbrace{\hat{U}\hat{U}^+}^{\hat{1}}\,\hat{A}\hat{U} + \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^+\hat{A}\,\overbrace{\hat{U}\hat{U}^+}^{\hat{1}}\,\hat{H}U + \hat{U}^+\frac{\partial A}{\partial t}\hat{U}$$

benutze: $\hat{U}^+\hat{H}\hat{U} = \hat{H}_H(t)$

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

und definiere: $\hat{U}^+\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\hat{U} =: \frac{\partial}{\partial t}\hat{A}_H(t)$

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

"ersetzt" die Schrödingergleichung im Schrödingerbild

Bemerkungen:

i) System mit zeitunabhängigem $\hat{H}$

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

$$\Rightarrow \hat{H}_H(t) = \hat{U}^+ \hat{H} \hat{U}$$

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

$$= \hat{H} e^{i/\hbar \hat{H}(t-t_0)} e^{-i/\hbar \hat{H}(t-t_0)} = \hat{H}\,\hat{1}$$

$$= \underbrace{\hat{H}}_{\text{Hamiltonoperator im Schrödingerbild}}$$

$$\boxed{\text{denn! } [\hat{H}, \hat{U}] = [\hat{U}, \hat{H}] = 0}$$

(i) Vergleich mit dem Ehrenfest'sche Theorem

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

gilt genau so auch im Heisenbergbild, da der Erwartungswert ja erhalten bleibt bei der unitären Transformation Schrödinger $\rightarrow$ Heisenberg!

BWGL im Heisenbergbild:

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

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

V.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

$$\hat{H}(t) = \underbrace{\hat{H}_0}_{\text{zeitunabh.}} + \underbrace{\hat{H}_1(t)}_{\text{zeitabh. Anteil}}$$

z.B. Kopplung an zeitl. oszillierendes elektr. 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

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

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

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

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

BWGL:

$$\frac{d\hat{A}_D(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\hat{A}_D(t) + \underbrace{\hat{U}_0^+\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\hat{U}_0}_{=:\frac{\partial\hat{A}_D(t)}{\partial t}} + \underbrace{\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\hat{U}_0^+\hat{A}\underbrace{\hat{H}_0\hat{U}_0}_{\hat{U}_0\hat{H}_0}}_{\hat{U}_0^+\hat{A}\hat{U}_0\hat{H}_0 = \hat{A}_D\hat{H}_0}$$

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

Dynamik der Operatoren im Dirac-Bild

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

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

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

Zustand im Schrödingerbild!!

Zeitentwicklung:

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

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 Schrödingerbild

voller Hamiltonian !!

Einsetzen:

$$|\dot{\psi}_D(t)\rangle = \frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 \underbrace{\hat{U}_0(t_0,t)}_{\hat{U}_0^+(t,t_0)}|\psi(t)\rangle - \underbrace{\hat{U}_0(t_0,t)}_{\hat{U}_0^+(t,t_0)}\frac{i}{\hbar}\hat{H}\,|\psi(t)\rangle$$

vertausche

$$\Rightarrow i\hbar\,|\dot{\psi}_D(t)\rangle = \left(-\hat{H}_0\hat{U}_0^+ + \hat{U}_0^+\hat{H}\right)|\psi(t)\rangle$$

$$= \left(-\hat{U}_0^+\hat{H}_0 + \hat{U}_0^+\hat{H}\right)|\psi(t)\rangle$$

benutze noch: $|\psi(t)\rangle = \left(\hat{U}_0(t_0,t)\right)^{-1}|\psi_D(t)\rangle$
(Def. des Dirac-Zustands)

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

$$i\hbar\,|\dot{\psi}_D(t)\rangle = \underbrace{\left(-\hat{U}_0^+\hat{H}_0\hat{U}_0 + \hat{U}_0^+\hat{H}\hat{U}_0\right)}_{\hat{U}_0^+\underbrace{(-\hat{H}_0+\hat{H})}_{\hat{H}_1(t)}\hat{U}_0}|\psi_D(t)\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar\,|\dot{\psi}_D(t)\rangle = \hat{H}_{1,D}(t)\,|\psi_D(t)\rangle}$$