Ehrenfestgleichung für Erwartungswerte

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

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

"Anschluss" an die klassische Mechanik: betrachte Observable $A(\{q\},\{p\},t)$ Hamilton-Formalismus

$\{q\} = q_1,\dots,q_f$

$$\frac{dA}{dt} = \{A,H\} + \frac{\partial A}{\partial t}$$

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

speziell: $\frac{d}{dt}\langle\hat{\underline{r}}\rangle = \frac{1}{m}\langle\hat{\underline{p}}\rangle$, $\frac{d}{dt}\langle\hat{\underline{p}}\rangle = -\langle\nabla V(\underline{r})\rangle$

"Bilder" (verschiedene Darstellung der Dynamik)

- Schrödingerbild : – Zeitabhängige Zustandsvektoren
  – Operatoren meist zeitunabhängig ($\hat{A}_S$)
  – Dynamische Gleichung: Schrödingergleichung

- Heisenbergbild
  – Operatoren sind zeitabhängig

betrachtete Zeit

Anfangszeit

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

Operator im Heisenbergbild

Zeitentwicklungsoperator (unitär: $\hat{U}^+\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^+ = 1$ $\Leftrightarrow \hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$

Falls $\underset{\hat{H}}{\hat{H}_S}$ zeitunabhängig:

$\hat{U}(t,0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$

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

Erwartungswert:

$$\underbrace{\langle\psi(t)|\hat{A}_S|\psi(t)\rangle}_{\text{Erwartungswert im Schrödingerbild}} = \underbrace{\langle\psi(t)|\hat{U}(t,0)}_{\langle\psi(0)|}\overbrace{\hat{U}^+(t,0)}^{}\underbrace{\hat{U}^+(t,0)\,\hat{A}_S\,\hat{U}(t,0)}_{\hat{A}_H(t)}\underbrace{\hat{U}^+(t,0)|\psi(t)\rangle}_{|\psi(0)\rangle}$$

$$= \langle \psi(0) | \hat{A}_H(t) \underbrace{|\psi(0)\rangle}$$

Zustand im Heisenbergbild (Zeitunabhängig!)

Dynamische Gleichung

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

Dirac-Bild (Wechselwirkungsbild)

Struktur von $\hat{H}$ im Schrödingerbild

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{H}^0}_{\text{bekannte Problem (Zeitunabhängig)}} + \underbrace{\hat{H}^1}_{\text{Störung: kann Zeitabhängig!}}$$

Sowohl Operatoren als auch Zustände sind Zeitabhängig

Operatoren:
$$\hat{A}_D(t) = \hat{U}_0^+(t,0)\, \hat{A}_S\, \hat{U}_0(t,0)$$
$$= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\, \hat{A}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}$$

Dynamik der Operatoren wird durch $\hat{H}_0$ bestimmt!

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_D(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_D, \hat{A}_D]$$

Dirac-Zustand: betrachte wieder Erwartungswert.

$$\underbrace{\langle \psi(t) | \hat{A}_S | \psi(t) \rangle}_{\text{Schrödingerbild}} = \langle \psi(t) | \hat{U}_0 \underbrace{\hat{U}_0^+ \hat{A}_S \hat{U}_0} \hat{U}_0^+ | \psi(t) \rangle$$
$$\stackrel{!}{=} \langle \psi_D(t) | \hat{A}_D(t) | \psi_D(t) \rangle$$

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

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

Dynamik wird durch die Störung bestimmt!

I. Relativistische Quantenmechanik

Erinnerung: (Grundzüge der QM)

bisher kennengelernt: nicht-relativistische QM mit Hamiltonoperator $\hat{H}$, den man mit Hilfe von Korrespondenzregeln aus der klass. Mechanik "herleiten" kann

$\Rightarrow$ Schrödingergleichung mit $\hat{H}$ als Bewegungsgleichung für die Zustände (hier: Ortsdarstellung (Wellenfunktion $\psi(\underline{r},t)$))

Konkret für ein freies Teilchen:

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

Korrespondenzregeln: $\hat{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i}\nabla$ (Ortsdarstellung)

$$E \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

Benutze auf beiden Seiten die Korrespondenzregel (mit $\frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$) und wende das auf $\psi(\underline{r},t)$

$$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\underline{r},t) = \hat{H}\psi(\underline{r},t) \qquad \text{Schrödingergleichung für ein freies Teilchen}$$

mit $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$

(für Teilchen im Potential:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\underline{r}) \longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\underline{r},t) = \hat{H}\psi(\underline{r},t)$$

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

Zusammenhang mit Dispersionsrelation:

benutze: $E \overset{!}{=} \hbar\omega$ (Frequenz), $\underline{p} = \hbar\underline{k}$ (Wellenvektor) (Welle-Teilchen Dualismus) (de Broglie Relation)

Für freies Teilchen (nicht-relativist.) folgt: $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$ $\qquad k = |\underline{k}|$ Wellenzahl

---

Warum nun relativistische QM?

Wesentliche Motivation: Begründung des Spins, Konsequenzen des Spins, z.B. Spin-Bahn-Wechselwirkung (Atomphysik)

I.1. Klein-Gordon-Gleichung

Ausgangspunkt:

Relativistische Energie-Impuls-Beziehung für ein freies Teilchen

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

mit c (Vakuum-)Lichtgeschwindigkeit, m_0 Ruhemasse und p: relativistischer mechanischer Impuls (3-dim Vektor)

$$\underline{p} = \gamma m_0 \underbrace{\underline{v}}_{\text{Teilchengeschwindigkeit}}$$

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

Limes $\underbrace{\left(\frac{v}{c}\right)^2}_{x} \to 0$: $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-x}} \xrightarrow[x \text{ klein}]{} 1 - \frac{1}{2}x \ldots \underset{x \to 0}{=} 1$

dann: $\underline{p} = m_0 \underline{v}$ entspricht klass. Ergebnis.

$(*)$ wird später zur Herleitung der Klein-Gordon-Gleichung benutzt

Exkurs zum Hintergrund von $(*)$ (spezielle Relativitätstheorie)

Vierer-Impuls

$$p^\mu \quad . \quad \mu = \underbrace{0}_{\text{zeitliche Komponente}}, \overbrace{1, 2, 3}^{\text{räumliche Komponente}}$$

$p^\mu = m_0 u^\mu$ (*1)

u^μ — Vierergeschwindigkeit

Wegelement

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

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

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

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

Skalarprodukt:

$dx^\mu dx_\mu \quad \left(\hat{=} \sum_{\mu=0,1,2,3} dx^\mu dx_\mu \right)$

$$u^0 = \gamma c$$

$\mu=1,2,3$: $u^\mu = \gamma v^\mu$ — Geschwindigkeit

$= c^2 (dt)^2 - (d\underline{r})^2$

$(dx)^2 + (dy)^2 + (dz)^2 = (ds)^2$ differentielles Längenquadrat

$\Rightarrow$ Viererimpuls explizit.

Grenzinvariante Größe!

$$p^0 = m_0 \gamma c = \frac{m_0}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} c$$

$\mu=1,2,3$ $$p^\mu = m_0 \gamma v^\mu = \frac{m_0 v^\mu}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$$

Diese drei Komponenten entsprechen den Komponenten des 'relativistischen mechanischen Impulses' (der in der Relativ. $E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$)

Die zeitliche Komponente des Viererimpulses (p^0) ist verbunden mit der relativistischen kinetischen Energie (relativist. Mechanik Minkowski-Kraft)

$$p^0 = \frac{1}{c} E_{kin}^{rel}$$

$$p^\mu = \Big(\underbrace{\frac{1}{c} E_{kin}^{rel}}_{\text{Zeitl. Kompon.}}, m_0 \gamma \underline{v} \Big) \quad (*2)$$

$\underline{v}$ — Geschwindigkeit in 3 Raumdimensionen)

betrachte jetzt Skalarprodukt $p^\mu p_\mu$

aus (*2): $$p^\mu p_\mu = \left(\frac{1}{c} E_{kin}^{rel}, m_0 \gamma \underline{v} \right) \begin{pmatrix} \frac{1}{c} E_{kin}^{rel} \\ -m_0 \gamma \underline{v} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{c^2} \left(E_{kin}^{rel} \right)^2 - \underbrace{(m_0 \gamma \underline{v})}_{\underline{p}}{}^2 \quad (\mathrm{I})$$

$\underline{p}$ — mechan. Anteil relativist. Impuls aus (*1) : $p^\mu = m_0 u^\mu$ es gilt: $u^\mu u_\mu = c^2$

$$\Rightarrow p^\mu p_\mu = m_0^2 u^\mu u_\mu = m_0^2 c^2 \quad (II)$$

$$(I) = (II) \Rightarrow \left(E_{kin}^{rel}\right)^2 = p^2c^2 + m_0^2 c^4$$

Wurzel ziehen

$\Rightarrow$ (*) (Ausgangsrelation)

Ende Exkurs

Zurück zur Herleitung der Klein-Gordon-Gleichung

$$(*) \quad E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2 c^4} \qquad \left(= E_{kin}^{rel}\right)$$

Dispersionsrelation?

benutze $E = \hbar\omega$, $p = \hbar k$ de-Broglie Relation (wie im nicht-relativist. Fall)

aus (*)
$$\hbar\omega = \sqrt{\hbar^2 k^2 c^2 + m_0^2 c^4}$$

also ganz anders als im nicht-relativist. Fall

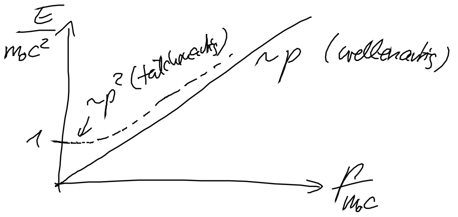
bei Vernachlässigung des 2. Terms unter der Wurzel

Abhängigkeit linear in k (anstatt quadratisch wie im nicht-relativist. Fall)

wie bei Lichtwellen!

Man kann sagen: Die relativist. Energie-Impulsbeziehung (und damit auch die Dispersionsrelation) interpoliert zwischen 2 Fällen: nicht-relativist. Teilchen und Licht-Welle

Illustration von (*)



m_0c^2: "Ruheenergie"

m_0c: "Ruheimpuls"

Frage:

Folgt aus der Anwendung der Korrespondenzregeln auf die relativist. Energie-Impuls-Relation wieder eine Bewegungsgleichung für den quantenmechan. Zustand (so wie bei der heurist. Herleitung der Schrödingergleichung)?