

Kapitel 3

Zeitentwicklung

Bisher haben wir uns mit Momentaufnahmen befasst. Ein wesentliches Anliegen der Physik ist es aber, vorherzusagen, wie sich der Zustand eines Systems entwickelt. Für die Quantenmechanik heißt das: Wie sieht der Zustand $|\psi(t)\rangle$ zur Zeit $t \geq t_0$ aus, wenn er zur Zeit $t = t_0$ bekannt ist?

3.1 Zeitentwicklungsoperator

Die Norm des Zustandes muss zu allen Zeiten Eins sein

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1, \quad (3.1)$$

denn die Norm ist reell und $|\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle|^2$ ist die „Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Zustand $|\psi(t)\rangle$ zu finden, wenn es im Zustand $|\psi(t)\rangle$ ist“. Diese Wahrscheinlichkeit ist natürlich gleich Eins. Die Zeitentwicklung wird deswegen durch einen unitären Operator beschrieben:

und (Postulate S.35)
 $|\langle a_j | \psi(t) \rangle|^2$
ist die Wahrscheinlichkeit,
bei einer Messung des
Zustands $|a_j\rangle$ den
Zustand $|a_j\rangle$ zu finden.

Dazu müssen $|a_j\rangle$ und $|a_{j'}\rangle$
normiert sein.

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

$$\underline{|\psi(t)\rangle} = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (3.2)$$

3.1. Zeitentwicklungsoperator

Die Unitarität $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{\mathbb{1}}$ sichert, dass sich die Norm von $|\psi(t)\rangle$ nicht ändert:

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

Wir verlangen sinnvollerweise, dass die Zeitentwicklung in separaten Zeitschritten durchgeführt werden kann, d.h. es soll die folgende Gruppeneigenschaft gelten:

$$\hat{U}(t_2, t_0) = \hat{U}(t_2, t_1) \cdot \hat{U}(t_1, t_0) \quad (3.3)$$

Um $\hat{U}(t, t_0)$ zu bestimmen, betrachten wir eine infinitesimale Zeitentwicklung. Man kann \hat{U} in eine Taylorreihe entwickeln, (in der QM erfüllt)

$$\hat{U}(t_0 + dt, t_0) = \hat{\mathbb{1}} - \frac{i}{\hbar} \hat{H} dt + \dots, \quad (3.4)$$

wobei der Faktor $(-\frac{i}{\hbar})$ eine Konvention ist.

Der Operator \hat{H} wird Hamilton-Operator genannt. Er beschreibt das Verhalten des Systems bei kleinen zeitlichen Änderungen und ist das Gegenstück zur Hamiltonfunktion in der klassischen Mechanik (s.u.). Aus der Unitarität von \hat{U} folgt, dass \hat{H} hermitesch ist, denn

$$\begin{aligned} \hat{\mathbb{1}} &\stackrel{!}{=} \hat{U}^\dagger(t_0 + dt, t_0) \hat{U}(t_0 + dt, t_0) \\ &= \left(\hat{\mathbb{1}} + \frac{i}{\hbar} \hat{H}^\dagger dt \right) \left(\hat{\mathbb{1}} - \frac{i}{\hbar} \hat{H} dt \right) + O((dt)^2) \\ &= \hat{\mathbb{1}} + \frac{i}{\hbar} (\hat{H}^\dagger - \hat{H}) dt + O((dt)^2) \\ &\Rightarrow \hat{H} = \hat{H}^\dagger \end{aligned}$$

Aus Gleichung (3.3) folgt

$$\begin{aligned} \hat{U}(t + dt, t_0) &= \hat{U}(t + dt, t) \cdot \hat{U}(t, t_0) \\ &= \left(\hat{\mathbb{1}} - \frac{i}{\hbar} \hat{H} dt \right) \hat{U}(t, t_0) + O((dt)^2) \\ &= \hat{U}(t, t_0) - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{U}(t, t_0) dt + O((dt)^2) \\ \hat{U}(t + dt, t_0) - \hat{U}(t, t_0) &\simeq -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{U}(t, t_0) dt \end{aligned}$$

Dies ist ein Differentialquotient¹, und wir erhalten die

SCHRÖDINGERGELEICHUNG FÜR DEN ZEITENTWICKLUNGSOPERATOR

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \cdot \hat{U}(t, t_0) \quad (3.5)$$

Anmerkung: Durch vorgegebene äußere Felder kann der Hamiltonoperator $\hat{H}(t)$ eines Systems selbst zeitabhängig sein, so wie auch in klassischen Systemen der Erzeuger der Zeitentwicklung (Hamilton-Funktion) zeitabhängig sein kann. Eine solche explizite Zeitabhängigkeit schreibt man auch oft mit einem unteren Index wie „ \hat{H}_t “. Wir werden der Übersichtlichkeit halber die Zeitabhängigkeit meist nicht explizit notieren. Wenn \hat{H} keine explizite Zeitabhängigkeit haben darf (sogenannter „stationärer Fall“), werden wir dies ausdrücklich erwähnen.

3.1.1 Formale Lösung für den Zeitentwicklungsoperator

Die Gleichung (3.5) kann man formal lösen, in einer für Anwendungen oft nützlichen Form. In diesem Abschnitt schreiben wir die Zeitabhängigkeit von $\hat{H}(t)$ ausdrücklich mit. Wenn \hat{H} explizit von der Zeit abhängt, gilt im allgemeinen $[\hat{H}(t_1), \hat{H}(t_2)] \neq 0$. Wir betrachten nur den häufigen Fall, dass alle Hamiltonoperatoren kommutieren: $[\hat{H}(t_1), \hat{H}(t_2)] = 0$ für alle Zeiten t_1, t_2 im Intervall t_0 bis t . Dann kann die Bewegungsgleichung mit dem Ansatz

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

gelöst werden.

Allgemeiner Fall:
siehe Kap. A.13

¹Das quantenmechanische System ist von weiteren Parametern, wie z.B. seiner Größe abhängig. Wenn wir diese Abhängigkeit berücksichtigen, sollten wir $\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, \dots)$ schreiben. Traditionell notiert man nur die Zeitabhängigkeit explizit und schreibt $\frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0)$. Mit beiden Schreibweisen ist dasselbe gemeint! Gleiches gilt für den Hamiltonoperator, den Zustandsvektor, etc.. Man wechselt zur Schreibweise $\frac{\partial}{\partial t}$, wenn die betrachtete Funktion ausdrücklich von mehr Argumenten abhängt, insbesondere bei der Wellenfunktion $\psi(x, t)$.

N.B. In der klassischen Mechanik gibt es eine Trajektorie $x(t)$. Deswegen muss man beim Ableiten von Funktionen $f(x(t), t)$ nach t spezifizieren, ob auch nach dem 1. Argument abgeleitet werden soll.
In der Quantenmechanik sind x und t unabhängige Variablen, die getrennt in der Wellenfunktion $\psi(x, t)$ auftauchen. Es gibt hier kein $x(t)$.

3.1. Zeitentwicklungsoperator

Beweis: Die Hamiltonoperatoren $\hat{H}(t)$ sind alle hermitesch. Zu jedem Zeitpunkt t haben sie deshalb eine Eigenbasis $\{|\varphi_n(t)\rangle\}$, mit $\hat{H}(t)|\varphi_n(t)\rangle = E_n(t)|\varphi_n(t)\rangle$ und reellen Eigenwerten $E_n(t)$.²

Da die Hamiltonoperatoren alle vertauschen, $[\hat{H}(t_1), \hat{H}(t_2)] = 0$, können sie gemeinsam diagonalisiert werden (s. Anhang, Theorem A.8), d.h. die Eigenbasis kann unabhängig von t gewählt werden. Dann hängen nur die Eigenwerte $E_n(t)$ von der Zeit ab. Die Eigenvektoren können auch orthonormal gewählt werden. Dann lautet die

SPEKTRALDARSTELLUNG
KOMMUTIERENDER HAMILTONOPERATOREN

$$\hat{H}(t) = \sum_n E_n(t) |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \quad (3.6)$$

Aus dem Spektralsatz (A.61c) folgt für Funktionen des Hamiltonoperators:

$$\hat{f}(\hat{H}(t)) = \sum_n f(E_n(t)) |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \quad (3.7)$$

Insbesondere gilt für obigen Ansatz

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(\tau) d\tau} = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t E_n(\tau) d\tau} |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \quad (3.8)$$

und er erfüllt in der Tat die Schrödingergleichung (3.5):

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) &= i\hbar \sum_n \frac{-i}{\hbar} E_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t E_n(\tau) d\tau} |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \\ &= \hat{H}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(\tau) d\tau} \\ &= \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0) \end{aligned}$$

²Um die Notation zu vereinfachen, nehmen wir eine diskreten Index n der Eigenwerte E_n an. Der Beweis kann direkt auch auf kontinuierliche Eigenwertspektren verallgemeinert werden.

Mit der Anfangsbedingung $\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}$ folgt wie behauptet der

ZEITENTWICKLUNGSOPERATOR
BEI KOMMUTIERENDEN HAMILTONOPERATOREN

Allgemeiner Fall:
siehe Kap. A.13

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(\tau) d\tau} = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t E_n(\tau) d\tau} |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| . \quad (3.9)$$

Im einfachsten und wichtigsten Fall, nämlich dass \hat{H} nicht von der Zeit abhängt, ist

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

Diesen Fall behandeln wir in Kapitel 3.4 weiter.

Im schwierigsten Fall, wenn $[\hat{H}(t_1), \hat{H}(t_2)] \neq 0$, kann die Gleichung (3.5) formal über die sogenannte *Dyson-Reihe* aufsummiert werden, bei der man die Operatoren in der Potenzreihenentwicklung von (3.9) zeitlich ordnet, deren Behandlung aber über den Rahmen dieser Vorlesung hinausgeht.

siehe Kapitel A.13.

3.2 Korrespondenzprinzip: Der Hamiltonoperator für einige wichtige Systeme

Es zeigt sich, dass der Hamilton-Operator eines quantenmechanischen Systems direkt zur Hamiltonfunktion des entsprechenden klassischen Systems korrespondiert. Man erhält ihn, indem man die Ortskoordinaten \vec{x} durch den Ortsoperator \hat{Q} und die Impulskoordinaten \vec{p} durch den Impulsoperator \hat{P} ersetzt. Zum Beispiel wird aus einem Potential $V(x) = kx^2$ der Operator $\hat{V}(\hat{Q}) = k\hat{Q}^2$. Der Ort wird somit durch den im Ortsraum diagonalen Operator und der Impuls durch den im Impulsraum diagonalen Operator ersetzt! Diese Ersetzung („Korrespondenz“) ist nicht offensichtlich. Sie ist letztlich durch den Erfolg gerechtfertigt.

Durch diese Ersetzung erhalten wir den

3.2. Korrespondenzprinzip; Wichtige Hamiltonoperatoren

HAMILTONOPERATOR FÜR EINIGE WICHTIGE SYSTEME

1. Teilchen im zeitunabhängigen Potential

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{P}^2}{2m}}_{\text{kin. Teil}} + \underbrace{\hat{V}(\vec{Q})}_{\text{pot. Teil}} \quad (3.10)$$

2. Geladenes Teilchen im äußeren elektromagnetischen Feld

("Minimalan Kopplung", kommt letztlich aus der Quantenelektrodynamik (QED))

$$\hat{H} = \frac{(\vec{P} - e\vec{A}(\vec{Q}, t))^2}{2m} + e\varphi(\vec{Q}, t) \quad (+ \vec{v}(\vec{Q}, t)) \quad (3.11)$$

\vec{A} : Vektorpotential (magn. Feld $\vec{B} = \text{rot } \vec{A}$); e : Elektronladung
 φ : Skalarpotential (el. Feld $\vec{E} = -\text{grad}\varphi - \frac{\partial}{\partial t}\vec{A}$)

Anmerkung 1: Das Korrespondenzprinzip überträgt sich auch auf verallgemeinerte Koordinaten p_α und q_β im Hamilton-Formalismus der klassischen Mechanik. Sie werden durch verallgemeinerte Operatoren \hat{P}_α und \hat{Q}_β ersetzt, die Vertauschungsrelationen wie die normalen Orts- und Impulsoperatoren gehorchen. Dies entspricht dem Ersetzen der Poissonklammer $\{p_\alpha, q_\beta\}$ der klassischen Mechanik durch den Kommutator $\frac{i}{\hbar} [\hat{P}_\alpha, \hat{Q}_\beta]$ in der Quantenmechanik. (Bei unklarer Reihenfolge, z.B. bei Produkten $\hat{P}\hat{Q}$, ist meist die hermitesche Kombination $(\hat{P}\hat{Q} + \hat{Q}\hat{P})/2$ korrekt).

Anmerkung 2: Es gibt eine zweite Methode, um von einem klassischen System mit einer Hamiltonfunktion H und zugehöriger klassischer Wirkung S zur Quantenmechanik desselben Systems zu gelangen. Diese von Feynman erfundene Pfadintegralmethode kommt sogar ganz ohne Operatoren aus! Sie postuliert, dass die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, dass ein Teilchen vom Punkt \vec{x} zur Zeit t nach \vec{x}' bei t' gelangt, proportional zur Summe über alle Wege von \vec{x} nach \vec{x}' ist, gewichtet mit $\exp(-\frac{i}{\hbar}S)$ für jeden Weg. Man kann zeigen, dass dies zum Korrespondenzprinzip äquivalent ist. Etwas mehr dazu in der Vorlesung zur fortgeschrittenen Quantenmechanik. Der Pfadintegralzugang wird häufig in der modernen Vielteilchenphysik und in der Elementarteilchenphysik verwendet.



60



3.2.1 Teilchen mit Spin

3. Neutrales Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen im Magnetfeld. Auf den Spin wirkt

$$\hat{H} = -\mu \vec{B} \hat{S} = -\mu (B_x \hat{S}_x + B_y \hat{S}_y + B_z \hat{S}_z) \quad (3.12)$$

\vec{B} : externes Magnetfeld, experimentell vorgegeben (Kein Operator).

\hat{S} : Spin-Operator

siehe (3.14)

20.3.2023

Dieser Hamilton-Operator wirkt z.B. im Stern-Gerlach-Experiment. Er ist analog zur klassischen Energiefunktion eines Teilchens mit Drehmoment in einem Magnetfeld, wobei es aber beim Spin keine entsprechende elementare Drehung gibt (s. Kap. 2.4).³

Der Zustandsvektor eines Teilchens mit Spin enthält sowohl eine Ortsabhängigkeit als auch eine Spin-Abhängigkeit. Der Zustandsvektor gehört daher zu einem Produktraum aus Orts- und Spin-Abhängigkeit. Es seien $|\sigma\rangle$ die Basisvektoren des Spinraums. Dann sind die Basisvektoren des Produktraums $|\vec{x}, \sigma\rangle = |\vec{x}\rangle \otimes |\sigma\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle \otimes |\sigma\rangle$ und ein allgemeiner Vektor des Produktraums ist

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int d\vec{x} f_{\sigma}(\vec{x}) |\vec{x}, \sigma\rangle = |\psi_{\uparrow}\rangle + |\psi_{\downarrow}\rangle. \quad (3.13)$$

Die Wellenfunktion ist $\psi(\vec{x}, \sigma) = \langle \vec{x}, \sigma | \psi \rangle = f_{\sigma}(\vec{x})$.

Der auf das Teilchen wirkende Hamiltonoperator ist die Summe des Hamiltonoperators Gl. (3.12) für den Spin und von Hamiltonoperatoren im Ortsraum wie Gl. (3.10) oder (3.11),

$$\hat{H} = -\mu \vec{B} \hat{S} + \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}(\vec{Q}). \quad (3.14)$$

Die Operatoren \hat{Q} und \hat{P} wirken dabei nur auf die Basisvektoren $|\vec{x}\rangle$ und der Operator \hat{S} nur auf die Basisvektoren $|\sigma\rangle$.

³Gl. (3.11) und (3.12) folgen beide aus der Dirac-Gleichung, der relativistischen Verallgemeinerung der Schrödingergleichung.

3.3. Schrödinger-Gleichung für den Zustand

3.3 Schrödinger-Gleichung für den Zustand

Aus der Schrödinger-Gleichung (3.5) für den Zeitentwicklungsoperator leiten wir nun die äquivalenten Schrödinger-Gleichungen für den Zustandsvektor und seine Darstellungen her, insbesondere für die Wellenfunktion $\psi(x, t)$.

Durch Anwenden von Gleichung (3.5) auf $|\psi(t_0)\rangle$ erhält man

$$i\hbar \frac{d}{dt} \underbrace{\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle}_{|\psi(t)\rangle} = \hat{H} \cdot \underbrace{\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle}_{|\psi(t)\rangle},$$

also die

SCHRÖDINGERGLEICHUNG FÜR DEN ZUSTANDSVEKTOR

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (3.15)$$

3.3.1 Schrödinger-Gleichung in einer diskreten Basis

Gleichung (3.15) ist die Schrödinger-Gleichung für den Zustandsvektor $|\psi(t)\rangle$. Wir können sie auch in einer Basis schreiben. Es sei z.B.

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j c_j(t) |e_j\rangle$$

mit diskreten orthonormalen Basisvektoren $|e_j\rangle$ (z.B. ein diskreter Ortsraum: $|e_j\rangle = |x_j\rangle$). Dann ist $|c_j(t)|^2 = |\langle e_j|\psi\rangle|^2$ die Wahrscheinlichkeit, zur Zeit t das Teilchen im Zustand $|e_j\rangle$ zu finden. Die Schrödinger-Gleichung Gl. (3.15) wird dann zu

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \equiv i\hbar \sum_j \frac{d}{dt} c_j(t) |e_j\rangle = \sum_j c_j(t) \hat{H} |e_j\rangle$$

und nach Multiplikation von links mit $\langle e_i |$ zu

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_i(t) = \sum_j \underbrace{\langle e_i | \hat{H} | e_j \rangle}_{H_{i,j}} c_j(t).$$

In Vektorform geschrieben ergibt das die

SCHRÖDINGERGL. FÜR DEN ZUSTAND, IN EINER DISKRETEN BASIS

$$i\hbar \frac{d}{dt} \vec{c}(t) = H \cdot \vec{c}(t) \quad , \quad (3.16)$$

wobei \vec{c} der Vektor der Entwicklungskoeffizienten c_j ist und H die Matrixdarstellung von \hat{H} in der Basis $|e_i\rangle$.

3.3.2 Kontinuierlicher Ortsraum: Wellenfunktion, Ortsoperator, Impulsoperator

Besonders wichtig ist die (im Anhang ausführlicher besprochene) kontinuierliche Ortsraumbasis. Die Darstellung des Zustandsvektors $|\psi(t)\rangle$ in der Ortsraumbasis $\{|\vec{x}\rangle = |x\rangle|y\rangle|z\rangle\}$ ist durch die Koeffizienten $\langle \vec{x} | \psi(t) \rangle$ gegeben. Dies ist die

WELLENFUNKTION

$$\psi(\vec{x}, t) = \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle \quad (3.17)$$

Die Bedeutung der Wellenfunktion ist analog zum diskreten Fall: Das Betragsquadrat $|\psi(\vec{x}, t)|^2 = |\langle \vec{x} | \psi \rangle|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, zur Zeit t das Teilchen am Ort \vec{x} anzutreffen. Das räumliche Integral über diese Dichte

$$\int_{\mathcal{V}} d^3\vec{x} |\psi(\vec{x}, t)|^2 \quad (3.18)$$

ist die Wahrscheinlichkeit, zur Zeit t das Teilchen im Volumen \mathcal{V} anzutreffen. Man beachte, dass \vec{x} und t in der Quantenmechanik unabhängige Variable sind. Es gibt keine Trajektorie $\vec{x}(t)$, sondern statt dessen die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(\vec{x}, t)|^2$.

3.3. Schrödingergleichung für den Zustand

Wir fassen im folgenden kurz die Eigenschaften von Orts- und Impulsoperator zusammen (s. Kap. A.6.4 und A.7.5).

Der Ortsoperator

$$\hat{Q} = (\hat{Q}_x, \hat{Q}_y, \hat{Q}_z) = \int_{-\infty}^{\infty} d^3x \vec{x} |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}| \quad (3.19)$$

hat drei unabhängige kartesische Komponenten mit den Eigenwertgleichungen

$$\hat{Q}_\alpha |\vec{x}\rangle = x_\alpha |\vec{x}\rangle \quad (\alpha = x, y, z) \quad (3.20)$$

$$\Rightarrow \hat{Q}_\alpha \psi(\vec{x}) = x_\alpha \psi(\vec{x}) \quad \text{z. B. } \langle \vec{x} | \hat{Q}_x | \psi \rangle \quad (3.21)$$

Den Erwartungswert des Ortsoperators erhält man z.B. durch Einsetzen der obigen Spektraldarstellung oder durch Einschleiben eines Einheitsoperators:

$$\langle \psi | \hat{Q} | \psi \rangle = \langle \psi | \int_{-\infty}^{\infty} d^3x |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}| \hat{Q} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d^3x \langle \psi | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \psi \rangle \quad (3.22)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{x} \vec{x} |\psi(\vec{x})|^2, \quad (3.23)$$

also durch Integration von \vec{x} mit der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(\vec{x})|^2$.

Der Impulsoperator (Kap. A.7.5)

$$\hat{P} = (\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z) = \int_{-\infty}^{\infty} d^3p \vec{p} |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} d^3x |\vec{x}\rangle \vec{\nabla} \langle\vec{x}| \quad (3.24)$$

hat ebenfalls drei unabhängige kartesische Komponenten, mit

$$\hat{P}_\alpha |\vec{p}\rangle = p_\alpha |\vec{p}\rangle \Rightarrow \hat{P}_\alpha \psi(\vec{x}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \psi(\vec{x}) \quad (\alpha = x, y, z) \quad (3.25)$$

Der Erwartungswert des Impulsoperators ist (Gl. (A.138))

$$\langle \psi | \hat{P} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d^3x \underbrace{\langle \psi | \vec{x} \rangle}_{\psi^*(\vec{x})} \langle \vec{x} | \hat{P} | \psi \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} d^3x \psi^*(\vec{x}) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}) \quad (3.26)$$

Die Kommutatoren der Orts- und Impulsoperatoren sind alle Null, bis auf diejenigen zwischen Orts- und Impulsoperator zu jeweils derselben kartesischen Richtung: (s.S. A69)

$$\underline{[\hat{Q}_\alpha, \hat{P}_\alpha] = i\hbar \hat{1}}, \quad \alpha = x, y, z. \quad (3.27)$$

Anmerkung: Der Übersichtlichkeit halber werden wir meist nur den Fall von **1 Dimension schreiben**, mit einer einzelnen Raumkoordinate „ x “ und Impuls „ p “, und dem Integral $\int_{-\infty}^{\infty} dx$, so wie auch schon im Anhang.

3.3.3 Schrödingergleichung im kontinuierlichen Ortsraum.

Die Schrödingergleichung (3.15) wird in der kontinuierlichen Ortsraum-basis durch Multiplikation von links mit $\langle \vec{x} |$ zu

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle \equiv \langle \vec{x} | \underline{i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle} = \langle \vec{x} | \underline{\hat{H} |\psi(t)\rangle} = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{x}' \underline{\langle \vec{x} | \hat{H} | \vec{x}' \rangle} \langle \vec{x}' | \psi(t) \rangle.$$

Die linke Seite ist die Zeitableitung der Wellenfunktion. Wir erhalten eine allgemeine Form der Schrödingergleichung im Ortsraum

$$\underline{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{x}' H(\vec{x}, \vec{x}') \psi(\vec{x}', t)} \quad (3.28) \quad \vec{x}$$

mit $\underline{H(\vec{x}, \vec{x}') := \langle \vec{x} | \hat{H} | \vec{x}' \rangle}$. (3.29)

Diese Gleichung ist analog zu (3.16).

Wir betrachten in der Regel ein Teilchen der Masse m , das sich in einem Potential bewegen kann. Der Hamiltonoperator ist dann nach Gl. (3.10)

$$\underline{\hat{H}_t = \underbrace{\frac{\hat{P}^2}{2m}}_{\text{kin. Teil}} + \underbrace{\hat{V}(\hat{Q}, t)}_{\text{pot. Teil}}}$$

(plus dem Term $-\mu \vec{B} \vec{S}$, wenn das Teilchen einen Spin hat).

3.3. Schrödingergleichung für den Zustand

Den Operator $\hat{V}(\hat{Q}, t)$ des Potentials kann man mit Hilfe der Spektraldarstellung des Ortsoperators $\hat{Q} = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{x} \vec{x} |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|$ und des Spektralsatzes schreiben:

x, x', x'' : Variablennamen

$$\hat{V}(\hat{Q}, t) = \int d\vec{x} V(\vec{x}, t) |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}| \Rightarrow \langle\vec{x}''|\hat{V}(\hat{Q}, t)|\vec{x}'\rangle = V(\vec{x}', t) \delta^{(3)}(\vec{x}'' - \vec{x}'). \quad (3.30)$$

$$\int dx V(x) \langle x'' | x \rangle \langle x | x' \rangle = \int dx V(x) \delta(x'' - x) \delta(x - x') = V(x') \delta(x'' - x')$$

Die Zeitentwicklung des Zustandes wird durch die zeitabhängige Schrödingergleichung

Von (3.28): $\int dx' \langle x | V(Q) | x' \rangle \psi(x')$

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

$$= \int dx' V(x') \delta(x - x') \psi(x')$$

$$= V(x) \psi(x)$$

beschrieben. In der Ortsdarstellung wird aus \hat{P}_α die Ableitung $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\alpha}$ und man erhält die

$$\langle x | \frac{\hat{P}^2}{2m} | \psi \rangle$$

ZEITABHÄNGIGE SCHRÖDINGERGLEICHUNG IM ORTSRAUM

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) \quad (3.31)$$

mit $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$. = Laplace-Operator

Der Erwartungswert der kinetischen Energie ist

$$E_{kin} = \langle \psi(t) | \frac{\hat{P}^2}{2m} | \psi(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d^3x \psi^*(\vec{x}, t) \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{x}, t) \quad (3.32)$$

und der Erwartungswert der potentiellen Energie

$$E_{pot} = \langle \psi(t) | \hat{V}(\hat{Q}, t) | \psi(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d^3x V(\vec{x}, t) |\psi(\vec{x}, t)|^2 \quad (3.33)$$

3.4 Stationärer Fall: Zeit-unabhängiger Hamilton-Operator

Wir haben die Zeitentwicklung über den Operator \hat{H} ausgedrückt. Wir betrachten nun den besonders häufigen Fall, dass der Hamiltonoperator selber nicht von der Zeit abhängt. Die Spektraldarstellung (3.6) lautet dann $\hat{H} = \sum_n E_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|$. Dies bezeichnet man als den stationären Fall. Der Zeitentwicklungsoperator (3.9) vereinfacht sich dann zu

ZEITENTWICKLUNGSOPERATOR FÜR ZEITUNABHÄNGIGES \hat{H}

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}} \quad (3.34)$$

$$= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_n} |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| . \quad (3.35)$$

Die Eigenwertgleichung⁴ eines zeitunabhängigen Hamiltonop. \hat{H} heisst

STATIONÄRE SCHRÖDINGERGLEICHUNG (EIGENWERTGLEICHUNG VON \hat{H})

$$\hat{H} |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle \quad (3.36)$$

Die Gesamtheit der Eigenzustände des hermiteschen Operators \hat{H} bilden eine Basis des Zustandsraums mit den vorgegebenen Randbedingungen (s. Kap. 4). Eine Lösung $|\psi(t)\rangle$ der Schrödingergleichung kann daher als Linearkombination der Eigenzustände geschrieben werden:

ZERLEGUNG EINES ZUSTANDS IN EIGENZUSTÄNDE VON \hat{H}

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\varphi_n\rangle . \quad (3.37)$$

⁴Im Ortsraum werden wir diese Gleichung in Kap. 4 behandeln.

3.4. Stationärer Fall: Zeit-unabhängiger Hamilton-Operator

Wir behandeln zunächst den Spezialfall, dass sich das System zur Zeit t_0 in einem normierten Eigenzustand $|\varphi_m\rangle$ befindet: $|\psi(t_0)\rangle = |\varphi_m\rangle$.

Mit dem Zeitentwicklungsoperator (3.34) erhalten wir die Zeitentwicklung

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}} |\psi(t_0)\rangle \\ &= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_n} |\varphi_n\rangle \underbrace{\langle \varphi_n | |\varphi_m\rangle}_{\delta_{nm}} \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_m} |\varphi_m\rangle . \end{aligned}$$

ZEITENTWICKLUNG EINES EIGENZUSTANDS IM STATIONÄREN FALL

$$\underline{|\psi(t_0)\rangle = |\varphi_m\rangle} \Rightarrow \underline{|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_m} |\varphi_m\rangle} . \quad (3.38)$$

Ein Eigenzustand von \hat{H} ändert sich mit der Zeit somit nur um einen Phasenfaktor. In Erwartungswerten $\langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle$ hebt sich dieser Phasenfaktor heraus. Deshalb sind alle Erwartungswerte und Wahrscheinlichkeiten bezüglich dieses Zustandes zeitlich konstant.

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

Linearkombination von Eigenzuständen:

Eine allgemeine Wellenfunktion ist eine Linearkombination (3.37) und man erhält die entsprechende Linearkombination von (3.38) für die Zeitentwicklung.

Eine Linearkombination von Eigenzuständen eines Operators zu verschiedenen Eigenwerten ist selber kein Eigenzustand!

Beispiel: Es sei $\hat{H} |\psi_i\rangle = E_i |\psi_i\rangle$ mit voneinander verschiedenen E_i .

Die Linearkombination

$$\underline{|\psi(0)\rangle := c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle}$$

$$\Rightarrow \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$$

ist kein Eigenzustand von \hat{H} , ~~denn~~ wenn E_1 ungleich E_2

$$\hat{H} |\psi(0)\rangle = E_1 c_1 |\psi_1\rangle + E_2 c_2 |\psi_2\rangle \neq E |\psi(0)\rangle .$$

Die Zeitentwicklung dieses Zustandes lautet

(E1 darf jetzt auch gleich E2 sein)

$$\begin{aligned}
 |\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |\psi(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t} c_1 |\psi_1\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar}E_2t} c_2 |\psi_2\rangle \\
 &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t} \left(c_1 |\psi_1\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)t} c_2 |\psi_2\rangle \right) \quad (3.39)
 \end{aligned}$$

Sie enthält einen globalen Phasenfaktor $e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t}$. Ein solcher Faktor hat generell keine physikalische Bedeutung, weil er sich in Erwartungswerten $\langle\psi(t)|\hat{O}|\psi(t)\rangle$ mit seinem komplex Konjugierten heraushebt. Dies ist die sogenannte „globale U(1) Eichsymmetrie“ der Quantenmechanik.⁵

Dagegen bewirkt die zeitabhängige Phasendifferenz $e^{-\frac{i}{\hbar}(E_1-E_2)t}$ in Gl. (3.39) zeitliche Oszillationen in Erwartungswerten (siehe z.B. Kap. 4 und 8).

Gesamtenergie: Im stationären Fall ist der Erwartungswert des Hamiltonoperators (so wie in der klassischen Physik die Hamiltonfunktion) gleich der Gesamtenergie des Systems im Zustand $|\psi(t)\rangle$.

(22.3.2021, ohne Seiten 61-66)

GESAMTENERGIE: ERWARTUNGSWERT DES HAMILTONOPERATORS
IM STATIONÄREN FALL

$$E = \langle\psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle. \quad (3.40)$$

Wahrsh., E_i zu messen

Skript

Man beachte: jede Einzelmessung ergibt eine Eigenenergie (s. Kap. 2.3.1). Der Erwartungswert ist aber in der Regel nicht gleich einer Eigenenergie. Beispiel (wie oben): $|\psi\rangle = c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle \Rightarrow E = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = |c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 E_2$.

Die Gesamtenergie ist zeitlich konstant, weil der Hamiltonoperator im stationären Fall mit dem Zeitentwicklungsoperator (3.34) kommutiert:

$$[\hat{H}, \hat{U}(t, t_0)] = 0$$

$$\langle\psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t_0)|\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{H}\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = \langle\psi(t_0)|\hat{H}|\psi(t_0)\rangle \quad (3.41)$$

Die zeitliche Konstanz gilt auch, wenn \hat{H} zeitabhängig ist, aber alle $\hat{H}(t)$ miteinander kommutieren, wie in (3.9).

⁵Mit der Kopplung (3.11) an das elektromagnetische Feld ist die Quantenmechanik auch unter den „lokalen Eichtransformationen“ $A_\mu \rightarrow A_\mu + \frac{\hbar}{q}\partial_\mu\Phi(x, t)$ der Elektrodynamik invariant.

Rechnung zum Beispiel unter Gl. (3.40): $|\psi\rangle = c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle$ mit $\langle 1|2\rangle = 0$, $\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1$, und $H = \sum_j E_j |j\rangle\langle j|$ (Eigenzustände von H hier der Kürze halber mit $|j\rangle$ bezeichnet)

$$\begin{aligned}
 \langle\psi|H|\psi\rangle &= (c_1^* \langle 1| + c_2^* \langle 2|) \left(\sum_j E_j |j\rangle\langle j| \right) (c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle) \\
 &= (c_1^* \langle 1| + c_2^* \langle 2|) (E_1 c_1 |1\rangle + E_2 c_2 |2\rangle) \\
 &= c_1^* c_1 E_1 + c_2^* c_2 E_2
 \end{aligned}$$

(gleiches Ergebnis mit zeitabhängigen Phasenfaktoren $\exp(-i/\hbar \int_{t_0}^t E_j) c_j$ statt c_j : Der Phasenfaktor fällt bei $c_j^* c_j$ wieder weg.)

3.5. Zeitabhängigkeit von Erwartungswerten

3.5 Zeitabhängigkeit von Erwartungswerten

Wir berechnen nun die Zeitabhängigkeit der Erwartungswerte eines Operators. Der Hamiltonoperator darf wieder zeitabhängig sein.

3.5.1 Kommutierende Hamiltonoperatoren

Die Hamiltonoperatoren sollen zu allen betrachteten Zeiten kommutieren, $[\hat{H}_t, \hat{H}_{t'}] = 0$.

① Wir betrachten zunächst einen Operator \hat{A} , der nicht explizit zeitabhängig ist und mit allen \hat{H}_t vertauscht:

$$[\hat{A}, \hat{H}_t] = 0.$$

Dann bleibt der Erwartungswert von \hat{A} zeitlich konstant:

$$\langle \psi(t_1) | \hat{A} | \psi(t_1) \rangle = \langle \psi(t_0) | e^{+\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} \hat{H}_\tau d\tau} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} \hat{H}_\tau d\tau} | \psi(t_0) \rangle.$$

In Kurzform:

Nicht explizit zeitabhängige Observable, die mit \hat{H} vertauschen, sind Erhaltungsgrößen“ d.h. Erwartungswert ist konstant

Beispiele sind etwa der Impuls in einem translationsinvarianten System, der Drehimpuls in einem rotationsinvarianten Fall, oder die Gesamtenergie bei einem nicht explizit zeitabhängigen Hamiltonoperator.

② Wir erlauben nun auch eine Zeitabhängigkeit der Observablen \hat{A}_t . Alle Operatoren \hat{A}_t und alle \hat{H}_t sollen kommutieren. Dann gibt es eine gemeinsame Basis von Eigenvektoren für alle \hat{A}_t und \hat{H}_t . Wir führen zur Zeit t_0 eine Messung mit dem Operator \hat{A}_{t_0} durch. Danach ist das System in einem Eigenzustand $|a\rangle$ von \hat{A}_t , d.h. $\hat{A}_t |a\rangle = a(t) |a\rangle$. Dieser Zustand ist in der gemeinsamen Basis auch Eigenzustand von \hat{H}_t , d.h. $\hat{H}_t |a\rangle = E_a(t) |a\rangle$. Die Zeitentwicklung nach der Messung lautet daher

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t E_a(\tau) d\tau} |a\rangle.$$

("Störung": ein Hamiltonoperator, der doch nicht mit A kommutieren würde)

Das System bleibt somit, wenn es nicht mehr gestört wird, bei kommutierenden Operatoren nach der Messung für alle Zeiten im Zustand $|a\rangle$ und erhält nur einen zeitabhängigen Phasenfaktor.

3.5.2 Allgemeiner Fall

Wir berechnen nun allgemein die Zeitentwicklung der Erwartungswerte eines Operators \hat{A}_t , der auch eine explizite Zeitabhängigkeit haben darf (unterer Index).

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{A}_t \rangle &= \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{A}_t | \psi(t) \rangle \\ &= \left(\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right) \hat{A}_t | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{A}_t \left(\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right) + \langle \psi(t) | \left(\frac{d}{dt} \hat{A}_t \right) | \psi(t) \rangle \end{aligned}$$

Kettenregel anwendbar!

Zu sehen durch zwischenzeitliche Einführung einer Basis; dann treten normale Funktionen auf, für die man die Kettenregel anwenden kann.

Wir setzen die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle = \hat{H}_t | \psi(t) \rangle$$

und die dazu adjungierte Gleichung (unter Benutzung von $\hat{H}_t^\dagger = \hat{H}_t$)

(weil H hermitesch ist)

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = \langle \psi(t) | \hat{H}_t$$

ein:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{A}_t \rangle &= \langle \psi(t) | \left(\frac{d}{dt} \hat{A}_t \right) | \psi(t) \rangle + \frac{i}{\hbar} \underbrace{\left(\langle \psi(t) | \hat{H}_t \hat{A}_t | \psi(t) \rangle - \langle \psi(t) | \hat{A}_t \hat{H}_t | \psi(t) \rangle \right)}_{\langle \psi(t) | [\hat{H}_t, \hat{A}_t] | \psi(t) \rangle} \\ &= \langle \psi(t) | \left(\frac{d}{dt} \hat{A}_t \right) | \psi(t) \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | [\hat{A}_t, \hat{H}_t] | \psi(t) \rangle \end{aligned}$$

oder anders geschrieben

ZEITABHÄNGIGKEIT VON ERWARTUNGSWERTEN

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A}_t \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}_t, \hat{A}_t] \rangle + \left\langle \left(\frac{d}{dt} \hat{A}_t \right) \right\rangle \quad (3.42)$$

3.5. Zeitabhängigkeit von Erwartungswerten

3.5.3 Beispiel: Spin-Präzession

Wir untersuchen die Zeitabhängigkeit des Spin-Erwartungswertes für ein Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ in einem äußeren Magnetfeld. Das Feld soll in z-Richtung zeigen.
(zeitunabhängig) ✓

$$\hat{H} = -\mu \cdot \vec{B} \cdot \vec{\hat{S}} = -\mu (B_x \hat{S}_x + B_y \hat{S}_y + B_z \hat{S}_z)$$

$$\vec{B} = B \cdot \vec{e}_z \Rightarrow \underline{\hat{H} = -\mu B \hat{S}_z}$$

Die Stärke B des Magnetfeldes ist hier ein Parameter und kein Operator. (In der Quantenelektrodynamik wird später auch das elektromagnetische Feld über Operatoren beschrieben.) Wir untersuchen, wie sich der Erwartungswert $\langle \hat{S}_\alpha \rangle$ zeitlich verändert, mit $\alpha = 1, 2, 3$ oder x, y, z . Gemäß Gl. (3.42) gilt, da $\frac{\partial}{\partial t} \hat{S}_\alpha = 0$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{S}_\alpha \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{S}_\alpha, \hat{H}] \rangle$$

$[\hat{S}_\alpha, \hat{H}]$ enthält den Kommutator von zwei Spin-Operatoren, den wir aus Gl. (2.34) kennen:

$$[\hat{S}_\alpha, \hat{H}] = -\mu \cdot B [\hat{S}_\alpha, \hat{S}_z] = -\mu \cdot B \cdot \overset{\text{Summe_beta}}{i\hbar \varepsilon_{\alpha z \beta}} \hat{S}_\beta \quad (\text{Summationskonvention !})$$

Einsetzen ergibt

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{S}_\alpha \rangle = -\mu B \varepsilon_{\alpha z \beta} \langle \hat{S}_\beta \rangle \quad (3.43)$$

Bei $\alpha = z$ verschwindet der ε -Tensor. Daher ist $\frac{d}{dt} \langle \hat{S}_z \rangle = 0$.
Eine erneute Zeitableitung liefert für $\alpha \neq z$

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{S}_\alpha \rangle = -\mu B \varepsilon_{\alpha z \beta} \underbrace{\frac{d}{dt} \langle \hat{S}_\beta \rangle}_{-\mu B \varepsilon_{\beta z \gamma} \langle \hat{S}_\gamma \rangle} = -(\mu B)^2 \underbrace{\varepsilon_{\alpha z \beta} \varepsilon_{\gamma z \beta}}_{\delta_{\alpha \gamma}} \langle \hat{S}_\gamma \rangle = -(\mu B)^2 \langle \hat{S}_\alpha \rangle$$

$$\Rightarrow \langle \hat{S}_\alpha \rangle = C_\alpha \cos(\mu B t) + D_\alpha \sin(\mu B t)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{S}_\alpha \rangle = -C_\alpha \mu B \sin(\mu B t) + D_\alpha \mu B \cos(\mu B t)$$

Zum Zeitpunkt $t=0$ folgt $\frac{d}{dt}\langle\hat{S}_\alpha\rangle(0) = D_\alpha\mu B$.

Andererseits gilt nach Gl. (3.43) $\frac{d}{dt}\langle\hat{S}_\alpha\rangle(0) = -\mu B \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \langle\hat{S}_\beta\rangle(0)$.

Daraus folgt $D_\alpha = -\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \langle\hat{S}_\beta\rangle(0)$.

Die allgemeine Lösung lautet somit (Summationskonvention)

$$\langle\hat{S}_\alpha\rangle(t) = \langle\hat{S}_\alpha\rangle(0) \cos(\mu B t) + \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \langle\hat{S}_\beta\rangle(0) \sin(\mu B t),$$

bzw. für die einzelnen kartesischen Komponenten

$$\begin{aligned} \langle\hat{S}_x\rangle(t) &= \langle\hat{S}_x\rangle(0) \cos(\mu B t) + \underbrace{\varepsilon_{x\beta\gamma} \langle\hat{S}_\beta\rangle(0)}_{\langle\hat{S}_y\rangle(0)} \sin(\mu B t) \\ &= \langle\hat{S}_x\rangle(0) \cos(\mu B t) + \langle\hat{S}_y\rangle(0) \sin(\mu B t) \end{aligned}$$

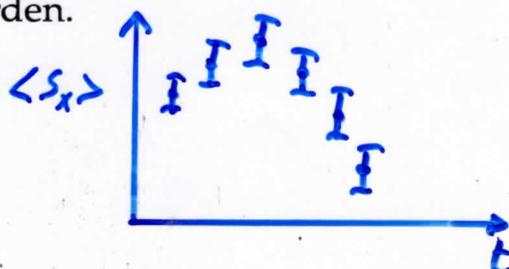
$$\begin{aligned} \langle\hat{S}_y\rangle(t) &= \langle\hat{S}_y\rangle(0) \cos(\mu B t) + \varepsilon_{y\beta\gamma} \langle\hat{S}_\beta\rangle(0) \sin(\mu B t) \\ &= \langle\hat{S}_y\rangle(0) \cos(\mu B t) - \langle\hat{S}_x\rangle(0) \sin(\mu B t) \end{aligned}$$

$$\langle\hat{S}_z\rangle(t) = \langle\hat{S}_z\rangle(0)$$

In Matrixschreibweise vereinfachen sich die Ausdrücke zu

$$\begin{pmatrix} \langle\hat{S}_x\rangle(t) \\ \langle\hat{S}_y\rangle(t) \\ \langle\hat{S}_z\rangle(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\mu B t) & \sin(\mu B t) & 0 \\ -\sin(\mu B t) & \cos(\mu B t) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\hat{S}_x\rangle(0) \\ \langle\hat{S}_y\rangle(0) \\ \langle\hat{S}_z\rangle(0) \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

und man erkennt eine Präzession: Der Vektor der Erwartungswerte $\langle\vec{S}\rangle$ rotiert mit einer Winkelgeschwindigkeit der Größe μB (Larmorfrequenz) um die Richtung des Magnetfeldes! Man beachte aber, dass jede Einzelmessung einer Komponente des Spins immer nur einen der beiden Werte $\hbar/2$ oder $-\hbar/2$ liefern wird. Um Gl. (3.44) experimentell zu überprüfen, muss man daher sehr viele Einzelmessungen durchführen, mit immer gleicher Präparation zur Zeit $t = 0$, und für mehrere Zeitabstände t jeweils Mittelwerte vieler Messungen berechnen. Auf diese Weise konnte Gl. (3.44) tatsächlich experimentell bestätigt werden.



3.6 Schrödinger-Bild und Heisenberg-Bild

Bisher haben wir die Zeitabhängigkeit des Systems durch Veränderung des Zustandsvektors beschrieben.

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$$

Die Operatoren bleiben dabei unverändert. Dieser Zugang zur Quantenmechanik wird Schrödinger-Bild genannt.

Dieses Vorgehen ist allerdings nicht die einzige Möglichkeit. Man erkennt das, wenn man untersucht, wie sich physikalisch beobachtbare Größen, nämlich Matrizelemente von Operatoren \hat{O} , unter einer unitären Transformation verhalten:

$$\langle\psi_1|\hat{O}|\psi_2\rangle \rightarrow \langle\psi_1|U^\dagger\hat{O}U|\psi_2\rangle$$

Denselben Wert des Matrizelements erhalten wir, wenn wir alternativ die Zustände festhalten und stattdessen die Operatoren transformieren.

$$\hat{O} \rightarrow \hat{O}' = \hat{U}^\dagger \hat{O} \hat{U} \quad (3.45)$$

Diesen Zugang nennt man Heisenberg-Bild.

Für die allgemeine Beschreibung lassen wir auch Operatoren \hat{O}_t zu, die schon im Schrödinger-Bild eine explizite, von außen vorgegebene Zeitabhängigkeit haben (z.B. eine Rotation des Messapparates), was durch den unteren Index t gekennzeichnet wird. In den meisten Fällen gibt es keine solche Zeitabhängigkeit; dann ist $\hat{O}_t = \hat{O}$ zeitunabhängig.

In der allgemeinen Definition geht man zu einem Zeitpunkt t_0 von dem einen zum anderen Bild über. Bei t_0 sollen beide Bilder gleich sein.

SCHRÖDINGER- UND HEISENBERGBILD

Schrödingerbild: $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$; $\hat{O}_t^S \equiv \hat{O}_t^H(t_0)$

Heisenbergbild: $|\psi\rangle \equiv |\psi(t_0)\rangle$; $\hat{O}_t^H(t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{O}_t^H(t_0) \hat{U}(t, t_0)$ (3.46)

Den Schrödinger-Operator \hat{O}_t^S schreibt man in der Regel kürzer als \hat{O}_t , mit weggelassenem Index S. Er hängt nur über den unteren Index von der Zeit ab. Der Heisenberg-Operator $\hat{O}_t^H(t)$ hängt sowohl explizit über den unteren Index als auch zusätzlich über den Zeitentwicklungsoperator des Systems von der Zeit ab. Sowohl beim Schrödinger-Operator als auch beim Heisenberg-Operator schreibt man allerdings oft den unteren Index t nicht mit.



Wegen

$$\hat{A}^H \hat{B}^H \hat{C}^H \dots = \underline{\hat{U}^\dagger \hat{A}^S \hat{U}} \underline{\hat{U}^\dagger \hat{B}^S \hat{U}} \underline{\hat{U}^\dagger \hat{C}^S \hat{U}} \dots = \underline{\hat{U}^\dagger \hat{A}^S \hat{B}^S \hat{C}^S \dots \hat{U}},$$

oder allgemeiner

$$(\hat{A}^H)^n (\hat{B}^H)^m (\hat{C}^H)^l \dots = \hat{U}^\dagger (\hat{A}^S)^n (\hat{B}^S)^m (\hat{C}^S)^l \dots \hat{U}$$

gilt für beliebige in Potenzreihen entwickelbare Funktionen:

$$\underline{f(\hat{A}^H, \hat{B}^H, \hat{C}^H, \dots)} = \underline{\hat{U}^\dagger f(\hat{A}^S, \hat{B}^S, \hat{C}^S, \dots) \hat{U}} \quad (3.47)$$

Insbesondere gilt für Kommutatoren

$$\underline{[\hat{A}^H, \hat{B}^H]} = \underline{\hat{U}^\dagger [\hat{A}^S, \hat{B}^S] \hat{U}} \quad (3.48)$$

Der Kommutator zwischen Orts- und Impulsoperator ist deswegen im Schrödingerbild und im Heisenbergbild gleich:

$$\underline{[\hat{Q}_\alpha^H, \hat{P}_\beta^H]} = \underline{\hat{U}^\dagger [\hat{Q}_\alpha^S, \hat{P}_\beta^S] \hat{U}} = \underline{i\hbar \delta_{\alpha\beta} \hat{1}} \quad (3.49)$$

Wir leiten nun die Bewegungsgleichung für die Heisenberg-Operatoren her.

$$\begin{aligned} \underline{\frac{d}{dt} \hat{O}_t^H(t)} &= \frac{d}{dt} \left(\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{O}_t^S \hat{U}(t, t_0) \right) \\ &= \left(\frac{d}{dt} \hat{U}^\dagger(t, t_0) \right) \hat{O}_t^S \hat{U}(t, t_0) + \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{O}_t^S \left(\frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) \right) \\ &\quad + \hat{U}^\dagger(t, t_0) \left(\frac{d}{dt} \hat{O}_t^S \right) \hat{U}(t, t_0) \end{aligned}$$

Mit $\frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_t \hat{U}$ und $\frac{d}{dt} \hat{U}^\dagger(t, t_0) = +\frac{i}{\hbar} \hat{U}^\dagger \hat{H}_t$ (wegen $\hat{H}_t^\dagger = \hat{H}_t$) ergibt zum Beispiel der erste Summand

$$\underline{\frac{i}{\hbar} \hat{U}^\dagger \hat{H}_t \hat{O}_t^S \hat{U}} = \frac{i}{\hbar} \underbrace{\hat{U}^\dagger \hat{H}_t \hat{U}}_{\hat{H}_t^H} \underbrace{\hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{O}_t^S \hat{U}}_{\hat{O}_t^H}$$

3.6. Schrödinger-Bild und Heisenberg-Bild

Der zweite Summand ist analog. Es folgt die Schrödingergleichung im Heisenbergbild:

BEWEGUNGSGLEICHUNG FÜR OPERATOREN IM HEISENBERGBILD

$$\frac{d}{dt} \hat{O}_t^H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_t^H(t), \hat{O}_t^H(t)] + \hat{U}^\dagger(t, t_0) \left(\frac{d}{dt} \hat{O}_t^S \right) \hat{U}(t, t_0) \quad (3.50)$$

$$= \hat{U}^\dagger(t, t_0) \left(\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_t^S, \hat{O}_t^S] + \frac{d}{dt} \hat{O}_t^S \right) \hat{U}(t, t_0) \quad (3.51)$$

analog
3.47

Die meisten Operatoren, mit denen man es in der Quantenmechanik zu tun hat, sind nicht explizit zeitabhängig. Dann fällt der zweite Summand weg. Der Hamiltonoperator selber ist meist entweder nicht explizit zeitabhängig oder die explizite Zeitabhängigkeit ist so, dass $[\hat{H}_{t'}^S, \hat{H}_{t''}^S] = 0$. In diesem Fall gilt mit Gl. (3.9)

$$\hat{H}_t^H(t) = \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_\tau^S d\tau}}_{\hat{U}^\dagger} \hat{H}_t^S \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_\tau^S d\tau}}_{\hat{U}} = \hat{H}_t^S .$$

$$\underline{[\hat{H}_{t'}^S, \hat{H}_{t''}^S] = 0} \Rightarrow \underline{\hat{H}_t^H(t) = \hat{H}_t^S} \quad (3.52)$$

Man beachte, dass diese Beziehung nur für \hat{H}_t als Ganzes gilt, aber nicht einzeln für Summanden wie $\hat{P}^2/2m$ oder $V(\hat{Q})$. A

3.6.1 Ehrenfest-Theorem: Teilchen im zeitunabhängigen Potential $V(\vec{x})$

Wir behandeln die Bewegung eines Teilchens in einem Potential $V(\vec{x})$, im Heisenbergbild. Den Index S für das Schrödingerbild lassen wir jetzt meist weg. Ab sofort werden wir den Ortsoperator auch mit den Symbolen $\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}$ bzw. $\hat{X}_1, \hat{X}_2, \hat{X}_3$ schreiben. Der Hamiltonoperator lautet damit

$$\hat{H}^S = \frac{\vec{\hat{P}}^2}{2m} + V(\vec{\hat{X}}) = \frac{\hat{P}_1^2 + \hat{P}_2^2 + \hat{P}_3^2}{2m} + V(\hat{X}_1, \hat{X}_2, \hat{X}_3)$$

Die Ortsoperatoren und die Impulsoperatoren und damit auch \hat{H}^S selbst hängen nicht explizit von der Zeit ab. Daher gilt mit (3.52) und (3.47) auch

$$\hat{H}^S = \hat{H}^H = \hat{U}^\dagger \hat{H}^S \hat{U} = \frac{(\vec{\hat{P}}^H)^2}{2m} + V(\vec{\hat{X}}^H).$$

$\hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$
 $\Rightarrow [\hat{H}, \hat{U}] = 0$

Wir benutzen nun die Beziehungen (A.152) und (A.153) aus dem Anhang:

$$[f(\vec{\hat{Q}}, \vec{\hat{P}}), \hat{P}_\alpha] = i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{Q}_\alpha} f(\vec{\hat{Q}}, \vec{\hat{P}}),$$

$$[\hat{Q}_\alpha, g(\vec{\hat{Q}}, \vec{\hat{P}})] = i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{P}_\alpha} g(\vec{\hat{Q}}, \vec{\hat{P}}),$$

$$\vec{\hat{X}} \approx \vec{\hat{Q}}$$

jetzt mit $g(\vec{\hat{Q}}, \vec{\hat{P}}) = \hat{H}^H$. Gleichung 3.50 ergibt dann

$$\frac{d}{dt} \hat{X}_\alpha^H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}^H, \hat{X}_\alpha^H] = \frac{\partial \hat{H}^H}{\partial \hat{P}_\alpha^H} = \frac{\hat{P}_\alpha^H}{m}. \quad (3.53)$$

Alternativ kann man mit Gl. (3.51) rechnen, mit demselben Ergebnis.

Genauso erhalten wir

$$\frac{d}{dt} \hat{P}_\alpha^H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}^H, \hat{P}_\alpha^H] = -\frac{\partial \hat{H}^H}{\partial \hat{X}_\alpha^H} = -\frac{\partial V(\vec{\hat{Q}}^H)}{\partial \hat{X}_\alpha^H}. \quad (3.54)$$

Die Gleichungen (3.53) und (3.54) zusammen zeigen:

3.6. Schrödinger-Bild und Heisenberg-Bild

Für ein Teilchen in einem zeitunabhängigen Potential $V(\vec{x})$ erfüllen die Heisenberg-Operatoren die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (\leftrightarrow Korrespondenzprinzip).

Durch Einsetzen der beiden Gleichungen ineinander folgt auch die

NEWTONSCHE BEWEGUNGSGLEICHUNG FÜR DEN ORTSOPERATOR

$$m \frac{d^2}{dt^2} \vec{X}^H = -\vec{\nabla}_{\vec{X}^H} V(\vec{X}^H) \quad (3.55)$$

Die gerade hergeleiteten Gleichungen gelten für Operatoren. Messbar sind aber nur Eigenwerte (Einzelmessung), und daraus erhaltene Mittelwerte, die dann zu den Erwartungswerten konvergieren. Wir erhalten aus Gl. (3.55) eine Gleichung für physikalisch zugängliche Größen, indem wir auf beiden Seiten den Erwartungswert mit dem Heisenberg-Zustand $|\psi\rangle = |\psi(t_0)\rangle$ bilden. Weil dieser Zustand zeitunabhängig ist, können wir die Zeitableitung vor den Erwartungswert ziehen und erhalten:

EHRENFESTSCHES THEOREM

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{X}_\alpha \rangle = \langle -\frac{\partial}{\partial \hat{X}_\alpha} V(\vec{\hat{X}}) \rangle \quad (3.56)$$

Dies ist ein Theorem zu Erwartungswerten und daher unabhängig davon, ob Rechnungen im Schrödinger- oder im Heisenbergbild durchgeführt werden. Gl. (3.56) sieht fast aus wie die klassische Bewegungsgleichung. Man beachte aber, dass links ein Erwartungswert abgeleitet wird, während rechts die Ableitung innerhalb des Erwartungswertes steht.

Beispiel: Kräftefreier Fall

Im kräftefreien Fall ist das Potential $V(x)$ räumlich konstant. Dann ergibt Gl. (3.54) (mit der Wahl $t_0 = 0$)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{P}_\alpha^H(t) = 0 &\Rightarrow \hat{P}_\alpha^H(t) = \hat{P}_\alpha^H(0) = \hat{P}_\alpha^S \\ \frac{d}{dt} \hat{X}_\alpha^H(t) &\stackrel{3.53}{=} \frac{\hat{P}_\alpha^H(t)}{m} = \frac{\hat{P}_\alpha^S}{m} \end{aligned}$$

Durch Integration erhalten wir

$$\hat{X}_\alpha^H(t) = \hat{X}_\alpha^S + \hat{P}_\alpha^S \frac{t}{m} \quad (3.57)$$

Diese Gleichung sieht aus wie die erwartete lineare Bewegung in der klassischen Physik, gilt aber wieder nur für Operatoren. Physikalisch beobachtbar sind Erwartungswerte:

$$\begin{aligned} \langle \hat{X}_\alpha^H(t) \rangle &= \langle \psi(0) | \hat{X}_\alpha^H(t) | \psi(0) \rangle \\ &= \langle \psi(0) | \hat{X}_\alpha^S | \psi(0) \rangle + \langle \psi(0) | \hat{P}_\alpha^S | \psi(0) \rangle \frac{t}{m}, \end{aligned} \quad (3.58)$$

die nun ebenfalls die erwartete lineare Beziehung zeigen. Aus Gl. (3.57) leitet sich allerdings eine interessante, klassisch nicht zu verstehende Eigenschaft her:

$$\begin{aligned} [\hat{X}_\alpha^H(t), \hat{X}_\beta^H(t')] &= [(\hat{X}_\alpha + \hat{P}_\alpha \frac{t}{m}), (\hat{X}_\beta + \hat{P}_\beta \frac{t'}{m})] \\ &= [\hat{X}_\alpha, \hat{X}_\beta] + \frac{t}{m} [\hat{P}_\alpha, \hat{X}_\beta] + \frac{t'}{m} [\hat{X}_\alpha, \hat{P}_\beta] + \frac{tt'}{m^2} [\hat{P}_\alpha, \hat{P}_\beta] \\ &= \frac{t' - t}{m} [\hat{X}_\alpha, \hat{P}_\beta] = i\hbar \delta_{\alpha\beta} \frac{t' - t}{m} \hat{1} \end{aligned}$$

Die Ortsoperatoren zu verschiedenen Zeiten vertauschen daher nicht mehr miteinander ! Daraus folgt mit Gl. (A.160) (Unschärferelation)

$$\Delta Q_\alpha(t) \Delta Q_\alpha(0) \geq \frac{\hbar}{2m} t \quad (3.59)$$

Das bedeutet, dass zwar der Erwartungswert des Ortes der klassischen Bewegung folgt, aber seine Unschärfe $\Delta Q_\alpha(t)$, d.h. die Streuung der Einzelmesswerte, mit der Zeit immer weiter anwächst. Das klassische Konzept der Trajektorie existiert somit in der Quantenmechanik nicht mehr, selbst bei einem freien Teilchen ! Wir können den Ort des Teilchens nicht mehr zu allen Zeiten beliebig scharf angeben.

3.6. Schrödinger-Bild und Heisenberg-Bild

Quadratischer Fall

Die Situation vereinfacht sich gegenüber einem beliebigen Potential, wenn $V(\vec{X})$ höchstens quadratisch ist. Wir betrachten der Einfachheit halber den harmonischen Oszillator in 1 Dimension mit dem klassischen Potential $V(x) = V_0 + \frac{k}{2}x^2$, entsprechend quantenmechanisch

$$V(\hat{X}) = V_0 + \frac{k}{2}\hat{X}^2.$$

Aus dem Ehrenfestschen Theorem wird hier

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{X} \rangle = \left\langle -\frac{\partial}{\partial \hat{X}} V(\hat{X}) \right\rangle = -k \langle \hat{X} \rangle \stackrel{\text{hier}}{=} -\frac{\partial}{\partial \langle \hat{X} \rangle} V(\langle \hat{X} \rangle). \quad (3.60)$$

Die erste Beziehung ist das Ehrenfest-Theorem, die zweite folgt durch Einsetzen des quadratischen Potentials, und die letzte Beziehung folgt, weil hier auch $\frac{dV(\langle \hat{X} \rangle)}{d\langle \hat{X} \rangle} = k \langle \hat{X} \rangle$ gilt. Für ein beliebiges höchstens quadratisches Potential erhält man analog

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{X}_\alpha \rangle = -\frac{\partial}{\partial \langle \hat{X}_\alpha \rangle} V(\langle \vec{X} \rangle).$$

Im höchstens quadratischen Fall gilt somit für den Erwartungswert $\langle \vec{X} \rangle$ die klassische Bewegungsgleichung!

Dagegen erfüllen die Einzelmesswerte keine solche Beziehung.



Man beachte, dass die klassische Bewegungsgleichung ^{für $\langle X \rangle$} nicht mehr zutrifft, wenn das Potential höhere Potenzen von x enthält, weil im Allgemeinen $\langle \hat{X}^n \rangle \neq \langle \hat{X} \rangle^n$. Zum Beispiel ist bei $V = \hat{X}^3$:

$$\left\langle \frac{d}{d\hat{X}} V(\hat{X}) \right\rangle = 3\langle \hat{X}^2 \rangle \neq 3\langle \hat{X} \rangle^2 = \frac{d}{d\langle \hat{X} \rangle} V(\langle \hat{X} \rangle).$$