English Summary:

1.4 Quantization

physical observable $\longrightarrow$ self-adjoint operator

commutation relations $[\hat{F},\hat{G}] \neq 0 \Rightarrow \hat{F},\hat{G}$ not simultaneously measurable

canonical commutation relations $[\hat{p}_i,\hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i}\delta_{ik}\mathbb{1}$

$$[\hat{p}_i,\hat{p}_k] = [\hat{x}_i,\hat{x}_k] = 0$$

Non-commutativity and uncertainty:

$$\boxed{\sqrt{\langle(\Delta\hat{F})^2\rangle}\sqrt{\langle(\Delta\hat{G})^2\rangle} \geq \frac{1}{2}\left|\langle[\hat{F},\hat{G}]\rangle\right|}$$

Heisenberg's uncertainty relation:

$$\boxed{\sqrt{\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle}\sqrt{\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle} \geq \frac{\hbar}{2}}$$

momentum-position uncertainty

1.5 Dynamik im Schrödinger-, Heisenberg-, Wechselwirkungsbild

Betrachte zeitabhängige Zustände $|\psi\rangle_t$:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_t = \hat{H}|\psi\rangle_t}$$ zeitabh. Schrödinger-Gl.

Formale Lösung:

$$\boxed{|\psi\rangle_t = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi\rangle_0 = U(t,0)|\psi\rangle_0}$$

Def. über Potenzreihe:

$$U(t,0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} := \sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{1}{\nu!}\left(-\frac{i}{\hbar}t\right)^\nu \hat{H}^\nu \quad \underline{\text{Zeitentw.op.}}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{1}{\nu!}\left(-\frac{i}{\hbar}t\right)^\nu \hat{H}^\nu|\psi\rangle_0 = \hat{H}\underbrace{\sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{1}{(\nu-1)!}\left(-\frac{i}{\hbar}t\right)^{\nu-1}\hat{H}^{\nu-1}|\psi\rangle_0}_{|\psi\rangle_t}$$

$U(t,0)$ ist <u>unitärer</u> Op.,
da $\hat{H}$ hermitesch.

Adjungierte Schrödingergl.

$${}_t\langle\psi|\hat{H} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,{}_t\langle\psi|$$

Formale Lösung:

$${}_t\langle\psi| = {}_0\langle\psi|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = {}_0\langle\psi|U^+(t,0)$$

<u>Erwartungswert</u> eines Op. $\hat{F} = \hat{F}(\hat{r}, \hat{p}, t)$

(explizite Zeitabh., z.B. über $\underline{A}(t)$)

$$\langle\hat{F}\rangle = {}_t\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle_t$$

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{F}\rangle = \frac{d}{dt}\,{}_t\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle_t$$

$$= {}_t\langle\psi|\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{F}\right)|\psi\rangle_t + \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t}\,{}_t\langle\psi|\right)}_{-\frac{1}{i\hbar}\,{}_t\langle\psi|\hat{H}}\hat{F}|\psi\rangle_t + {}_t\langle\psi|\hat{F}\underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_t\right)}_{\frac{1}{i\hbar}\hat{H}|\psi\rangle_t}$$

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

Für einen nicht explizit t-abhängigen Op. $\hat{F}$ gilt:

$$[\hat{H},\hat{F}] = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{F}\rangle = 0$$

Klassisches Analogon: Poisson-Klammer

Sei $F(\underline{q},\underline{p},t)$ klass. Obs., $H(\underline{q},\underline{p})$ klass. Hamiltonfkt.

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3}\left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i}\dot{p}_i\right)$$

$$= \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3}\left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)$$

$$= \frac{\partial F}{\partial t} + \underbrace{\{F, H\}}_{\text{Poisson-Klammer}}$$

Also

$$\{H, F\} \longrightarrow -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{F}]$$

Definiere Observable „zeitliche Veränderung von $F(\underline{q},\underline{p},t)$"

$$\langle \mathring{F} \rangle := \frac{d}{dt}\langle \hat{F} \rangle$$

Operator $\boxed{\mathring{F} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{F}] + \frac{\partial \hat{F}}{\partial t}}$

Fundamentalbeziehung der Dynamik der Quantentheorie

- keine Dgl. für $\hat{F}$, da i.a. $\mathring{F} \neq \frac{d}{dt}\hat{F}$,

  vielmehr ist $\mathring{F}$ definiert über Erwart.wert $\langle \mathring{F} \rangle := \frac{d}{dt}\langle \hat{F} \rangle$

speziell gilt:

$$\left.\begin{aligned}\mathring{\underline{r}} &= \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\underline{r}}] \\ \mathring{\underline{p}} &= \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\underline{p}}]\end{aligned}\right\} \hat{=} \text{ klass. Hamilton'sche Gln.}$$

Mit $\hat{H} = \frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m} + V(\hat{\underline{r}})$, $[\hat{H}, x_k] = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_k}$; $[\hat{H}, \hat{p}_k] = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}_k}$

folgt

$$\mathring{\underline{r}} = \frac{\hat{\underline{p}}}{m}$$

$$\dot{\hat{\underline{p}}} = -\underline{\nabla} V(\hat{\underline{r}})$$

Daraus folgt das <u>Ehrenfest'sche Theorem</u>:

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle \hat{\underline{r}} \rangle &= \frac{1}{m}\langle \hat{\underline{p}} \rangle \\ \frac{d}{dt}\langle \hat{\underline{p}} \rangle &= -\langle \underline{\nabla} V(\underline{r}) \rangle \end{aligned}}$$

d.h. die Erwartungswerte gehorchen den klass. Beweg.gln.

<u>Bilder</u>:

Da Erwartungswerte invariant bei unitären Trafos U sind, sind Operatoren und Zustände nur bis auf <u>Unitär-Äquivalenz</u> festgelegt:

$$|\psi\rangle \longrightarrow |\psi'\rangle = U|\psi\rangle$$

$$\hat{F} \longrightarrow \hat{F}' = U\hat{F}U^{+}$$

Für verschiedene, zeitabh. U erhält man verschied. <u>Bilder</u> (im Folgenden sei $\frac{\partial}{\partial t}\hat{F} = 0$):

(a) <u>Schrödinger-Bild</u>:

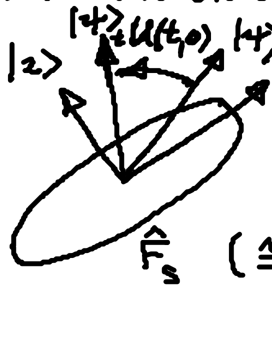
Operatoren $\hat{F}_s(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}})$ zeit<u>un</u>abh.

Eigenvektoren $|n\rangle$ zeit<u>un</u>abh.

Zustandsvektoren $|\psi\rangle_t$ zeitabh.

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_t = \hat{H}|\psi\rangle_t}$$

Veranschaulichung im $\mathbb{R}^2$: $|\psi\rangle_t = U(t,0)|\psi\rangle_0$



$|1\rangle$ Eigenvektor ($\hat{=}$ Hauptachsen)

$\hat{F}_s$ ($\hat{=}$ 2×2 Matrix, definiert symm. quadrat. Form $x^T A x = 1$)

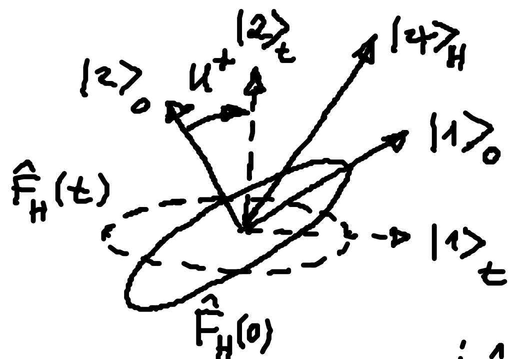
(b) **Heisenberg-Bild**

$$\langle \hat{F}_S \rangle = {}_t\langle \psi | \hat{F}_S | \psi \rangle_t = {}_0\langle \psi | \underbrace{U^+(t,0)\,\hat{F}_S\, U(t,0)}_{\hat{F}_H(t)} | \psi \rangle_0$$

Operatoren $\hat{F}_H(t)$ zeitabhängig

Eigenvektoren $|n\rangle$ zeitabhängig

Zustandsvektoren $\boxed{|\psi\rangle = |\psi\rangle_0 = |\psi\rangle_H}$ zeit<u>un</u>abh.



Aus $\hat{F}_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\, \hat{F}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$

folgt

$$\frac{d\hat{F}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar}\hat{H}\underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\,\hat{F}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}}_{\hat{F}_H} + \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\,\hat{F}_S}_{\hat{F}_H}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\right) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

$$\boxed{\frac{d\hat{F}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{F}_H\right]} \quad \text{d.h.} \quad \mathring{F} = \frac{d}{dt}\hat{F}_H$$

im Heisenberg-Bild

Insbesondere:

$$\frac{d\hat{H}_H}{dt} = 0 \qquad \text{also} \quad \boxed{\hat{H}_H = \hat{H}_S = \hat{H}} \quad \text{bild\underline{un}abh.}$$

(c) **Wechselwirkungs-Bild**

(Dirac)

Sei $\hat H = \hat H^0 + \hat H^1$ mit $\hat H^0$ ungestörter Ham.op.

$\hat H^1$ Störung

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

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d\hat F_W}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat H^0, \hat F_W]} \Rightarrow \frac{d\hat H^0}{dt} = 0 \Rightarrow \hat H^0 \text{ bildunabh.}$$

$$\frac{d\hat H_W}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat H, \hat H_W] = \frac{i}{\hbar}[\hat H^0, H^1_W] \neq 0 \quad \underline{\text{i.a.}}$$

$$_t\langle\psi|\hat F_S|\psi\rangle_t = \underbrace{_t\langle\psi|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H^0 t}}_{_W\langle\psi|}\;\underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat H^0 t}\,\hat F_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H^0 t}}_{\hat F_W(t)}\;\underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat H^0 t}|\psi\rangle_t}_{|\psi\rangle_W}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}|\psi\rangle_W = \frac{i}{\hbar}\hat H^0 \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat H^0 t}|\psi\rangle_t}_{|\psi\rangle_W} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat H^0 t}\cdots\cdots \underbrace{\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_t}_{\frac{1}{i\hbar}\hat H_S|\psi\rangle_t = \frac{\hat H_S}{i\hbar}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H^0 t}\cdots\cdots|\psi\rangle_W}$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left(-\hat H^0|\psi_W\rangle + \underset{\cdots}{\hat H_W}|\psi\rangle_W\right)$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left(\cancel{-\hat H^0} + \cancel{\hat H^0} + \hat H^1_W\right)|\psi\rangle_W$$

$$\boxed{i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle_W = \hat H^1_W\,|\psi\rangle_W}$$

$$\left.\begin{array}{l}\text{Operatoren } \hat F_W \\ \text{Eigenvektoren } |n\rangle\end{array}\right\}\ \text{zeitabh. durch ungestörten Ham.op. } \hat H^0$$

Zustandsvektoren $|\psi\rangle_W$ zeitentw. durch Störop. $\hat H^1_W$