Schrödingerbild: Zeitabhängigkeit der Zustände

$$i\hbar\,|\dot\psi(t)\rangle = \hat H\,|\psi(t)\rangle$$

Heisenbergbild

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

unitär!

$$\underbrace{|\psi_H\rangle}_{\text{zeitl. konstant}} = \overbrace{\hat U^{-1}(t,t_0)}^{\hat U^{+}(t,t_0)}\,|\psi(t)\rangle \quad , \quad \hat A_H(t) = \hat U^{+}(t,t_0)\,\hat A\,\hat U(t,t_0)$$

$$\frac{d}{dt}\hat A_H(t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat A_H(t), \hat H_H(t)\right] + \frac{\partial}{\partial t}\hat A_H(t)$$

vergl.

Ehrenfest-Theorem: $\frac{d}{dt}\langle \hat A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat A, \hat H]\rangle + \langle \frac{\partial \hat A}{\partial t}\rangle$

beachte: Erwartungswerte sind bildunabhängig!

V.5. Dirac-Bild (Wechselwirkungsbild)

$$\hat H(t) = \hat H_0 + \underbrace{\hat H_1(t)}$$

$\boxed{\text{Sowohl Zustände als auch Observablen sind zeitabhängig!}}$

Wechselwirkungsterm („Störung")

z.B. oszillierendes $\underline{E}$-Feld oder $\underline{B}$-Feld

Observablen

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

Zeitentwicklungsoperator im Schrödingerbild zum Hamiltonian $\hat{H}_0$

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

beachte: $\hat{H}_0$ ist per definitionem zeitunabhängig!

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

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

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

Dynamik der Observablen ist durch $\hat{H}_0$ bestimmt

(Unterschied zum Heisenbergbild: Dort wird $\hat{A}_H(t)$ durch den vollen Hamiltonian bestimmt)

Zustände im Dirac-Bild

definiere: $|\psi_D(t)\rangle = \underbrace{\hat{U}_0(t_0,t)}_{\hat{U}_0^+(t,t_0)} |\psi(t)\rangle$ Zustand im Schrödingerbild zur Zeit t

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

Zeitentwicklung

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

benutze: $\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}_0(t_0,t) = \frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\hat{U}_0(t_0,t)$ und $\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle \underset{SG}{=} \frac{1}{i\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle$

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

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

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

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

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = \hat{U}_0^{-1}(t_0,t)|\psi_D(t)\rangle$$
$$= \hat{U}_0(t,t_0)|\psi_D(t)\rangle$$

• $\hat{H} - \hat{H}_0 = \hat{H}_1(t)$
Wechselwirkungsterm

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

mit $\hat{H}_{1,D}(t) = \hat{U}_0^{+}\hat{H}_1(t)\hat{U}_0$

sieht formal wie die gewöhnliche SG aus!

Konkret: Die Dynamik der Zustände im Dirac-Bild ist durch den „Wechselwirkungsterm" $\hat{H}_1(t)$ bestimmt!

Dirac-Bild wird besonders wichtig bei der sog. zeitabhängigen Störungstheorie (Atome in Lichtfeldern) → s. Ende der VL

VI. Quantentheorie des Drehimpulses

VI.1. Der Drehimpulsoperator

klassischer Drehimpuls: $\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p} \Rightarrow$
$$L_x = y p_z - z p_y$$
$$L_y = z p_x - x p_z$$
$$L_z = x p_y - y p_x$$

Übergang zur QM (Korrespondenzprinzip)

$\underline{r} \to \hat{\underline{r}}$, $\underline{p} \to \hat{\underline{p}}$ und $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$

⇒ Drehimpulsoperator: $\hat{\underline{L}} = \hat{\underline{r}} \times \hat{\underline{p}}$

(genauer: Bahndrehimpulsoperator)!

es gibt einen weiteren Drehimpuls, den Spin!

Eigenschaften

i) $\hat{\underline{L}}$ ist hermitesch: z.B. $\hat{L}_x^+ = (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)^+$

$$= \hat{p}_z^+\hat{y}^+ - \hat{p}_y^+\hat{z}^+$$

da $\hat{\underline{p}}, \hat{\underline{r}}$ hermitesch

$$= \hat{p}_z\hat{y} - \hat{p}_y\hat{z}$$

$$= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = \hat{L}_x \;!$$

da verschiedene Komponenten von $\hat{\underline{r}}$ und $\hat{\underline{p}}$ vertauschen!

ii) $$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\underbrace{(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)}_{\hat{L}_x}, \underbrace{(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)}_{\hat{L}_y}] = \ldots = i\hbar\hat{L}_z$$

2./3. Übungszettel

allgemein:

⊛ $\boxed{[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\hat{L}_k}$ mit (i,j,k) zyklisch

- die Komponenten des Drehimpulses vertauschen nicht (d.h. sie sind nicht gleichzeitig scharf messbar!)

  und man kann kein gemeinsames System aus Eigenzuständen finden!

- Ganz allgemein heißen Operatoren mit Vertauschungsrelationen dieser Art (⊛) „Drehimpulsoperatoren" in der QM

⇒ Spin $\hat{\underline{S}}$ genügt analogen Relationen!

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\hat{S}_k$$

iii) es gilt:

$$[\hat{\underline{L}}^2, \hat{L}_i] = 0 \quad \forall i = 1,2,3$$

mit $\hat{\underline{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$

d.h. $\hat{\underline{L}}^2$ und jedes $\hat{L}_i$ besitzen gemeinsame Eigenzustände und sind gleichzeitig scharf meßbar!

typischerweise betrachtet man als relevante Komponente die z-Komponente $\hat{L}_z$

$$[\hat{\underline{L}}^2, \hat{L}_z] = 0 \qquad \text{(reine Konvention)}$$

iv) <u>Leiteroperatoren</u>

↪ werden benutzt zur Lösung des Eigenwertproblems von $\hat{\underline{L}}^2$ und $\hat{L}_z$ (wie beim harmon. Oszillator!)

definiere:

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$$
$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$$

da $\hat{L}_i = \hat{L}_i^\dagger$ für $i = x,y,z$

damit:

$$(\hat{L}_+)^\dagger = \hat{L}_x^\dagger - i\hat{L}_y^\dagger = \hat{L}_x - i\hat{L}_y = \hat{L}_-$$
$$(\hat{L}_-)^\dagger = \hat{L}_x^\dagger + i\hat{L}_y^\dagger = \hat{L}_x + i\hat{L}_y = \hat{L}_+$$

die Leiteroperatoren sind <u>nicht</u> hermitesch!

Vertauschungsrelation:

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = [(\hat{L}_x + i\hat{L}_y), (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)]$$
$$= \cancel{[\hat{L}_x, \hat{L}_x]} - i\underbrace{[\hat{L}_x, \hat{L}_y]}_{i\hbar\hat{L}_z} + i\underbrace{[\hat{L}_y, \hat{L}_x]}_{-i\hbar\hat{L}_z} + \cancel{[\hat{L}_y, \hat{L}_y]}$$
$$= 2\hbar\hat{L}_z$$

außerdem:

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar \hat{L}_\pm \quad ; \quad [\hat{\underline{L}}^2, \hat{L}_\pm] = 0$$

da $\hat{\underline{L}}^2$ mit jeder Komponente von $\hat{L}_i$ vertauscht

IV. 2. Das Eigenwertproblem des Drehimpulses

Wir wissen bereits: $[\hat{\underline{L}}^2, \hat{L}_z] = 0$

$\Rightarrow$ suche gemeinsamen Eigenzustände (EZ) von $\hat{\underline{L}}^2$ und $\hat{L}_z$ sowie die zugehörigen Eigenwerte (EW)

$$\hat{\underline{L}}^2 |\alpha, \beta\rangle = \alpha |\alpha, \beta\rangle \qquad \langle \alpha', \beta' | \alpha, \beta\rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'}$$

$$\hat{L}_z |\alpha, \beta\rangle = \beta |\alpha, \beta\rangle$$

d.h. wir charakterisieren die EZ durch <u>zwei</u> „Quantenzahlen" α und β

„Hintergedanke": $\hat{\underline{L}}^2$ und $\hat{L}_z$ bilden einen vollständigen Satz kommutierender Observablen!

Eine erste Aussage zu den α, β kann man sofort machen:

$\hat{\underline{L}}$ hermitesch $\rightarrow$ $\hat{\underline{L}}^2$ hermitesch

$$\Rightarrow \langle \alpha,\beta | \underbrace{\hat{L}^2 |\alpha,\beta\rangle}_{\alpha|\alpha,\beta\rangle} = \alpha \underbrace{\langle \alpha,\beta|\alpha,\beta\rangle}_{1} = \alpha$$

$$= \sum_{i=1}^{3} \langle \alpha,\beta | \underbrace{\hat{L}_i^2}_{\hat{L}_i \hat{L}_i} |\alpha,\beta\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{3} \underbrace{\langle \hat{L}_i \alpha,\beta | \hat{L}_i \alpha,\beta\rangle}_{\underbrace{\langle \Phi_i | \Phi_i \rangle}_{\geq 0}} \quad \text{mit } |\Phi_i\rangle = \hat{L}_i |\alpha,\beta\rangle$$

jeder Summand ist positiv!

d.h. $\alpha \geq 0$!

$$\geq \underbrace{\langle \alpha,\beta | \hat{L}_z^2 |\alpha,\beta\rangle}_{\beta^2}$$

benutze $\hat{L}_z |\alpha,\beta\rangle = \beta |\alpha,\beta\rangle$

Folgerung: $\boxed{\alpha \geq \beta^2 \geq 0} \Leftrightarrow \boxed{-\sqrt{\alpha} \leq \beta \leq \sqrt{\alpha}}$