English Summary:

2.4 Quantization

physical observable $\longrightarrow$ self-adjoint operator

commutation relations $[\hat{F}, \hat{G}] \neq 0 \quad \Rightarrow \hat{F}, \hat{G}$ 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:

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

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

Die Quantenmechanik ist keine Wellen- oder Teilchenmechanik, sondern eine Zustandsmechanik! (Auflösung des Dualismus Welle-Teilchen in einen einheitlichen Formalismus)

2.5 Dynamik im Schrödinger-, Heisenberg-, Wechselwirkungsbild

Betrachte zeitabhängige Zustände $|\psi\rangle_t$:

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

Formale Lösung:

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

Definition über Potenzreihe:

$$U(t,0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} := \sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{1}{\nu!}\left(-\frac{i}{\hbar}t\right)^{\nu}\hat{H}^{\nu}$$ <u>Zeitentwicklungsop.</u>

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

□

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

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

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. $\hat{F} = \hat{F}(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}}, t)$

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

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

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

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

Für einen nicht explizit t-abhängigen Operator $\hat{F}$ 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. Observable, $H(\underline{q},\underline{p})$ 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 $F(\underline{q},\underline{p},t)$":

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

Fundamentalbeziehung der Dynamik der Quantentheorie, aber keine Dgl. für $\hat{F}$, da i.a. $\mathring{\hat{F}} \neq \frac{d}{dt}\hat{F}$, vielmehr ist $\mathring{\hat{F}}$ definiert über Erwartungswert:

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

speziell gilt: $\mathring{\underline{r}} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\underline{r}}]$, $\mathring{\hat{\underline{p}}} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\underline{p}}]$ $\hat{=}$ klass. Hamilton'schen Gln.

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

folgt

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

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

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

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

d.h. die Erwartungswerte gehorchen den klass. Bewegungsgln.

<u>Bilder</u>:

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

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

Für verschiedene, zeitabhängige U erhält man verschiedene <u>Bilder</u> (im folgenden sei $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0$):
keine <u>explizite</u> Zeitabhängigkeit

(a) <u>Schrödinger-Bild</u>:

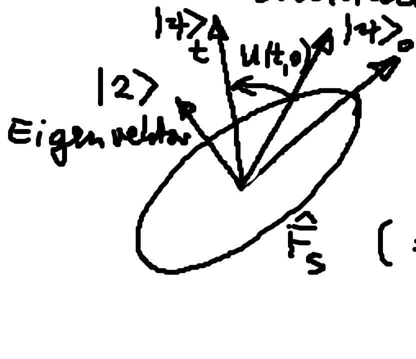
Operatoren $\hat{F}_s(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}})$ zeit<u>un</u>abhängig

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

Zustandsvektoren $|\psi\rangle_t$ zeitabhängig

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

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



Eigenvektor ($\hat{=}$ Hauptachsen)

($\hat{=}$ 2x2 Matrix, definiert symm. quadrat. Form)
$\underline{x}\,\underline{\underline{F}}\,\underline{x} = 1$

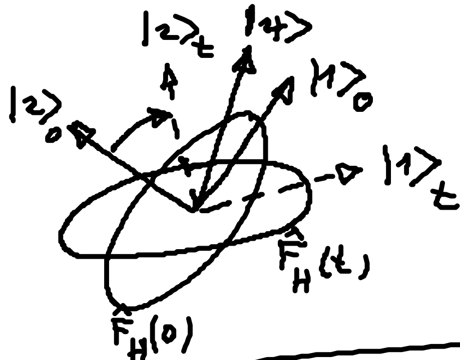
(b) <u>Heisenberg-Bild</u>

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

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

Eigenvektoren $|n\rangle$ zeitabhängig

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



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

folgt $\boxed{\frac{d\hat{F}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{F}_H\right]}$ d.h. $\overset{\circ}{F} = \frac{d}{dt}\hat{F}_H$

im Heisenberg-Bild

Insbesondere:

$\frac{d\hat{H}_H}{dt} = 0$ also $\boxed{\hat{H}_H = \hat{H}_S = H}$ bildunabhängig

(c) Wechselwirkungs-Bild (Dirac-Bild)

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

$$\boxed{\hat{F}_W(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^0 t}\,\hat{F}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^0 t}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d\hat{F}_W}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}^0, \hat{F}_W\right]} \Rightarrow$$

$\frac{d\hat{H}^0}{dt} = 0 \Rightarrow \hat{H}^0$ bildunabh.

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

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

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

$$= \frac{1}{i\hbar}\Big(-\hat{H}^0|\psi\rangle_W + \underbrace{H_W}_{\hat{H}^0 + \hat{H}^1_W}|\psi\rangle_W\Big)$$

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

Operatoren $\hat{F}_W$
Eigenvektoren $|n\rangle$
} zeitabhängig durch ungestörten Hamiltonop. $\hat{H}^0$

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