7.11.2007

7.11.2007

II.5 Zeitentwicklung in der QM

Bewegungsgleichung

$$i\hbar \, \partial/\partial t \, |\Psi(t)\rangle = \hat{H}(t) \underbrace{|\Psi(t)\rangle}_{\text{zeitabhängiger Ket}}$$

Hamiltonian i.A. zeitabhängig

z.B. $\hat{H}(t) = \frac{p^2}{2m} + V(x,t)$

5.1. Zeitunabh. Hamiltonian $\hat{H}$

Formale Lösung

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i/\hbar \, \hat{H} \cdot (t-t_0)} \, |\Psi(t=t_0)\rangle$$

$$t \geq t_0$$

Anfangswertproblem gelöst.

Zeitentwicklungsoperator (Propagator)

$$\hat{U}(t,t_0) \equiv e^{-i\hat{H}(t-t_0)} \quad ; \quad \hbar = 1$$

[Erinn: $e^X = 1 + X + \frac{1}{2}X^2 + \frac{1}{6}X^3 + \ldots$]

- $\hat{U}$ ist unitär, d.h. $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$,

$$H = H^\dagger \; ; \quad \mathcal{U}\mathcal{U}^\dagger = \mathbb{1} \, .$$

Zeitentwicklung ist unitär, d.h.

$$\langle \Psi(t) | \underbrace{\Psi(t)\rangle}_{\mathcal{U}(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle} = \langle \Psi(t_0) | \underbrace{\mathcal{U}^\dagger(t,t_0)\,\mathcal{U}(t,t_0)}_{\mathbb{1}} | \Psi(t_0) \rangle$$

$$= \langle \Psi(t_0) | \Psi(t_0) \rangle$$

$$= 1$$

Geometrisch als Rotation im Hilbertraum.

Beispiele: $|\Psi(t_0)\rangle = |n\rangle$ mit

EZ von $\hat{A}$, d.h. $\hat{A}|n\rangle = E_n |n\rangle$

$$\Rightarrow \quad |\Psi(t)\rangle = e^{-i/\hbar \, E_n (t-t_0)} |n\rangle$$

Beweis: $$|\Psi(t)\rangle = \underbrace{e^{-i/\hbar \, \hat{A}(t-t_0)}}_{\left[1 - i/\hbar \, H(t-t_0) + \frac{1}{2}(\quad)^2 + \ldots\right]} |n\rangle$$

$$\left[1 - i/\hbar \, H(t-t_0) + \frac{1}{2}(\quad)^2 + \ldots\right] |n\rangle$$

$$= \left(1 - i/\hbar \, E_n (t-t_0) + \frac{1}{2}\left[\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)\right]^2 + \ldots\right) |n\rangle$$

$$= e^{-i/\hbar \, E_n (t-t_0)} |n\rangle$$

„triviale Zeitentwicklung" von Eigenzuständen des Hamiltonians.

- Sei $|\Psi(t_0)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle$ Linearkomb. (Superposition)

$$\Rightarrow \quad |\psi(t \geq t_0)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-iE_n(t-t_0)} |n\rangle$$

für einen beliebigen Anfangszustand $|\psi(t_0)\rangle$.

<u>Beispiel</u>: $|\psi(t_0)\rangle = \alpha|1\rangle + \beta|2\rangle$

$$\Rightarrow |\psi(t \geq t_0)\rangle = \alpha e^{-iE_1(t-t_0)}|1\rangle + \beta e^{-iE_2(t-t_0)}|2\rangle$$

z.B. $t_0 = 0$.

z.B. $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1$ hier nachrechnen

$|1\rangle \perp |2\rangle$, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

Erwartungswerte von Observablen $\hat{A}$.

$$\langle\hat{A}\rangle_{t=0} \equiv \langle\hat{A}\rangle_{|\psi(t=0)\rangle} = \langle\psi(0)|\hat{A}|\psi(0)\rangle$$

$|\psi(0)\rangle$ normiert

$$\langle\hat{A}\rangle_{t \geq 0} \equiv \langle\hat{A}\rangle_{|\psi(t \geq 0)\rangle} = \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle$$

$$= \underbrace{\langle\psi(0)e^{iHt}|}_{\langle\psi(t)|} A \underbrace{e^{-iHt}|\psi(0)\rangle}_{|\psi(t)\rangle}$$

Bra $\langle\psi(t)|$ $|\psi(t)\rangle$ Ket

<u>Bemerkung</u> Ket $\hat{A}|\psi\rangle \Leftrightarrow$ Bra $\langle\psi|A^\dagger$

Skalarprodukt zw. $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$:

$$(|\psi\rangle, |\phi\rangle) \equiv \langle\psi|\phi\rangle$$

$$\Big(\underbrace{\hat{A}|\psi\rangle}_{\text{Ket}},\ |\phi\rangle\Big) = \Big(|\psi\rangle,\ \hat{A}^{\dagger}|\phi\rangle\Big) \equiv \langle\psi|\,\hat{A}^{\dagger}\phi\rangle$$

$$\equiv \langle\underbrace{\psi\hat{A}^{\dagger}}_{\text{Bra}}|\phi\rangle$$

Damit haben wir

$$\langle\hat{A}\rangle_t = \langle\psi(0)|\underbrace{e^{+i\hat{H}t}\,\hat{A}\,e^{-i\hat{H}t}}_{\hat{A}(t)}|\psi(0)\rangle$$

$$\boxed{\hat{A}(t) \equiv e^{i\hat{H}t}\,\hat{A}\,e^{-i\hat{H}t} \qquad (2.30)}$$

Zeitentwicklung von Operatoren $\hat{A}$ im Heisenbergbild

Interpretation:

Erwartungswerte $\langle\hat{A}\rangle_t = \langle\underbrace{\psi(t)}_{\text{zeitentwickelt}}|\hat{A}|\psi(t)\rangle$ — $\hat{A}$ konstant

Operator A ist konstant
Zustand $|\psi(t)\rangle$ entwickelt sich „Schrödinger-Bild"

$$= \langle \Psi(0) | \underbrace{\hat{A}(t)}_{\text{zeitentw.}} | \underbrace{\Psi(0)}_{\text{konstant}} \rangle$$

Operator $\underline{\hat{A}(t) = e^{iHt} A e^{-iHt}}$ entwickelt sich

Zustand $|\Psi(0)\rangle$ bleibt konstant

„Heisenberg-Bild"

- Im Heisenbergbild hat man die Bewegungsgleichung

$$d/dt\, \hat{A}(t) = iH\hat{A}(t) - i\hat{A}(t)H = i[H, \hat{A}(t)]$$

$$\boxed{d/dt\, \hat{A}(t) = i[\hat{H}, \hat{A}(t)]}$$

- Häufig schreibt man $\hat{A}_H(t)$ (H als Index)
- Falls die Operatoren $\hat{A}$ bereits eine intrinsische Zeitabhängigkeit haben (d.h. bereits im Schrödingerbild) $\hat{A} = \hat{A}(t)$

$$\Rightarrow \quad \langle \hat{A} \rangle_t = \langle \Psi(t) | \underbrace{\hat{A}(t)}_{\text{intrins. Zeitabh.}} | \Psi(t) \rangle$$

z.B. $V(x,t)$ Potential

$$\Rightarrow \quad \boxed{d/dt\, \hat{A}_H(t) = i[H, A_H(t)] + e^{iHt} \frac{d}{dt} \hat{A}(t) e^{-iHt}} \qquad (2.33)$$

II 5.2 Zeitabhängiger Hamiltonian $\mathcal{H}(t)$.

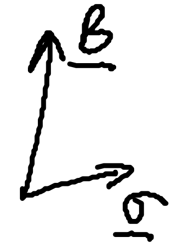
Spin 1/2, 2 Niveausystem, NMR

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \underline{B}(t)\,\underline{\sigma} = \begin{pmatrix} B_z(t) & B_\parallel^*(t) \\ B_\parallel(t) & -B_z(t) \end{pmatrix}$$

$\underline{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$

$\underline{B} = (B_x, B_y, B_z)$, $\quad B_\parallel = B_x + i B_y$

$\quad B_\parallel^* = B_x - i B_y$



Wo kommt das her?

Pauli : (1.35 i)

$$i \frac{\partial}{\partial t} \varphi = \left[\frac{1}{2m} (p - e\underline{A})^2 - \overbrace{\frac{e\hbar}{2m} \underline{\sigma}}^{\underline{\mu}} \underline{B} + e\phi \right] \varphi$$

magn. Moment $\underline{\mu}$, $\quad E_{\mu} = -\underline{\mu}\,\underline{B}$

$E_d = -\underline{d}\,\underline{E}$ (Dipolmoment)

- WF φ ist ein Spinor. Wir schreiben

$$\varphi(\underline{x},t) = \begin{pmatrix} \varphi_1(\underline{x},t) \\ \varphi_2(\underline{x},t) \end{pmatrix}.$$

Falls die Ortsabhängig separiert werden kann,

$$\varphi(\underline{x},t) = \underbrace{\Psi(\underline{x})}_{\text{Ortswellenfkt.}} \underbrace{\begin{pmatrix} \chi_1(t) \\ \chi_2(t) \end{pmatrix}}_{\text{Spinor}}$$

$$\begin{array}{ccccc} |\varphi(t)\rangle & = & |\Psi\rangle & \otimes & |\chi(t)\rangle \\ \cap & & \cap & & \\ \mathcal{H} & = & \mathcal{H}_{ORT} & \otimes & \mathcal{H}_{SPIN} \end{array}$$

gesamt. HR

$\mathcal{H}_{ORT} = L^2(\mathbb{R}^3)$ HR der quadratintegrierbaren Fkt auf $\mathbb{R}^3$

$\mathcal{H}_{SPIN} = \mathbb{C}^2$ HR der Spin-$\frac{1}{2}$ Spinore

Lösung der SG:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\chi(t)\rangle = \hat{A}(t) |\chi(t)\rangle, \quad |\chi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \chi_1(t) \\ \chi_2(t) \end{pmatrix}$$

$$\Longleftrightarrow \quad i\dot{\chi}_1 = B_z \chi_1 + B_\parallel^* \chi_2$$
$$i\dot{\chi}_2 = B_\parallel \chi_1 - B_z \chi_2$$

2×2 gew. DGL System

kann für zeitabhängige $B_\parallel, B_z$ (zeitabh. $\underline{B}$) i.A.

nur numerisch gelöst werden.

Spezialfälle können analytisch gelöst werden.

a) $\underline{B} = \text{const} \Rightarrow$ QM Oszillationen

$$\hat{H} = \underline{\sigma}\,\underline{B}$$

EW von $\hat{H}$ $\quad \varepsilon_\pm = \pm|\underline{B}| = \pm\sqrt{B_z^2 + |B_\parallel|^2}$

CHECK

$\Rightarrow$ Zeitentw.: $\mathcal{U}(t,0) = e^{-i\hat{H}t}$

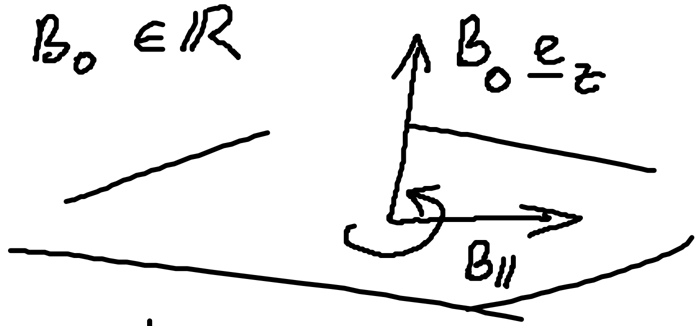
$$\left(\hat{H} = SDS^{-1}\right) = S\, e^{-iDt} S^{-1}; \quad D = \begin{pmatrix} \varepsilon_+ & \\ & \varepsilon_- \end{pmatrix}.$$

Alternativ: Ansatz $\chi_{1/2}(t) = c_{1/2}\, e^{-izt}$

$\Rightarrow$ z Bestimmen.

b) Rotierendes $\underline{B}$-Feld $\rightarrow$ Rabi-Oszillationen

Hier $B_z \equiv B_0 = \text{const},\ B_0 \in \mathbb{R}$



$$B_\parallel(t) = B_1 e^{i\omega t}, \quad B_1 \in \mathbb{R}$$
$$= \underbrace{B_1 \cos\omega t} + i\,\underbrace{B_1 \sin\omega t}$$

$B_x \qquad B_y$

$B_{\|}$ rotiert in x-y-Ebene „Drehwellenmethode"

$\Leftrightarrow$ „Drehwellen-Näherung"
(RWA)

<u>Ansatz</u>:
$$x_1(t) = c_1 e^{-izt - i\frac{\omega}{2}t}$$
$$x_2(t) = c_2 e^{-izt + i\frac{\omega}{2}t}$$

CHECK
$\Rightarrow$
$$\left(z + \frac{\omega}{2}\right) c_1 = B_0 c_1 + B_1 c_2$$
$$\left(z - \frac{\omega}{2}\right) c_2 = B_1 c_1 - B_0 c_2$$

Nichttriviale Lösungen
$$0 = \begin{vmatrix} z + \frac{\omega}{2} - B_0 & -B_1 \\ -B_1 & z - \frac{\omega}{2} + B_0 \end{vmatrix} = z^2 - \left(B_0 - \frac{\omega}{2}\right)^2 - B_1^2$$

$$\Rightarrow \quad z_\pm = \pm \frac{1}{2}\Omega_R, \quad \Omega_R \equiv \sqrt{(2B_0 - \omega)^2 + 4B_1^2}$$

Rabi-Frequenz.

Zwei l.u. Lösungen
$$x_2(t) = c_+ e^{i\left(\frac{\omega}{2} + \frac{\Omega_R}{2}\right)t} + c_- e^{i\left(\frac{\omega}{2} - \frac{\Omega_R}{2}\right)t}$$

$c_\pm \in \mathbb{C}$

$$= e^{i\frac{\omega}{2}t}\left\{\alpha\cos\frac{\Omega_R}{2}t + \beta\sin\frac{\Omega_R}{2}t\right\}$$

$\alpha,\beta \in \mathbb{C}$

Für x_1 entsprechend, Koeff. hängen mit denen von x_1 über die DGL zusammen.

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = x_1\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + x_2\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$