

## English Summary:

### 1.4 Quantization

physical observable  $\rightarrow$  self-adjoint operator

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

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

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

Non-commutativity and uncertainty:

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

Heisenberg's uncertainty relation:

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

momentum-position uncertainty

### 1.5 Dynamik im Schrödinger-, Heisenberg-, Wechselwirkungsbild

Betrachte zeitabhängige Zustände  $| \psi \rangle_t$ :

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

zeitabh. Schrödinger-Gl.

Formale Lösung:

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

Def. über Potenzreihe:

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

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

$U(t, 0)$  ist unitäre Op.,  
da  $\hat{H}$  hermitesch.

Adjungierte Schrödingergl.

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

Formale Lösung:

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

Erwartungswert eines Op.  $\hat{F} = \hat{F}(\hat{x}, \hat{p}, t)$

(explizite Zeitabh., z.B. über  $A(t)$ )

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

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

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

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

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  $F(q, p, t)$  klass. Obs.,  $H(q, p)$  klass. Hamiltonfkt.

$$\begin{aligned}\frac{dF}{dt} &= \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \left( \frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) \\ &= \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \left( \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \\ &= \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\} \\ &\quad \text{POISSON-KLAMMER}\end{aligned}$$

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

Definiere Observable „zeitliche Veränderung von  $F(q, p, t)$ “

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

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

Fundamentalbeziehung der Dynamik der Quantentheorie

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

niedmehr ist  $\overset{\circ}{F}$  definiert über Erwart.wert  $\langle \overset{\circ}{F} \rangle := \frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle$

speziell gilt:  $\left. \begin{aligned} \overset{\circ}{r} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{r}] \\ \overset{\circ}{p} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}] \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \cong \text{klass.} \\ \text{Hamilton'sche} \\ \text{gen.} \end{array}$

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

folgt  $\overset{\circ}{r} = \frac{\hat{p}}{m}$

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

Daraus folgt das Ehrenfest'sche Theorem:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{r} \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = - \langle \nabla V(\hat{r}) \rangle$$

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

Bilder:

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

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

$$\hat{F} \rightarrow \hat{F}' = U \hat{F} U^\dagger$$

Für verschiedene, zeitabh.  $U$  erhält man verschied.

Bilder ( in Folgenden sei  $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0$  ):

(a) Schrödinger - Bild:

Operatoren  $\hat{F}_S(\hat{r}, \hat{p})$  zeitunabh.

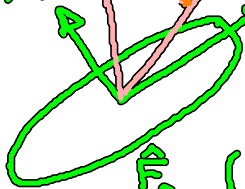
Eigenvektoren  $|n\rangle$  zeitunabh.

Zustandsvektoren  $|\psi\rangle_t$  zeitabh.

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

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

$|1\rangle$   $|2\rangle$   $U(t, 0)$   $|\psi\rangle_0$   $|\psi\rangle_t$   $|1\rangle$   $|2\rangle$  Eigenvektor ( $\hat{=}$  Hauptachsen)



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

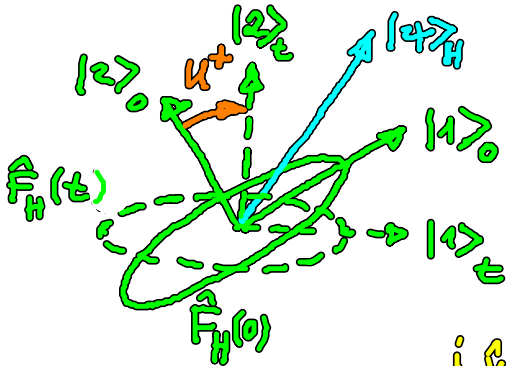
## (b) Heisenberg-Bild

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

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

Eigenvektoren  $|n\rangle$  zeitabhängig

Zustandsvektoren  $|\psi\rangle = |\psi\rangle_0 = |\psi\rangle_H$  zeitunabh.



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

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

$$\boxed{\frac{d\hat{F}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}_H]}$$

d.h.  $\dot{F} = \frac{d\hat{F}_H}{dt}$   
im Heisenberg-Bild

Interpretation:

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = 0$$

also  $\boxed{\hat{H}_H = \hat{H}_S = \hat{H}}$  bilddunabh.

## (c) Wechselwirkungs-Bild (Dirac)

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

$$\hat{F}_w(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{F}_s e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t}$$

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

$$\frac{d\hat{H}_w}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{H}_w] = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}^0, \hat{H}_w^1] + 0$$

$$\langle \psi | \hat{F}_s | \psi \rangle_t = \langle \psi | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{F}_s e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \psi \rangle_t \quad \text{i.a.}$$

$\underbrace{\langle \psi |}_w \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{F}_s e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t}}_{\hat{F}_w(t)} \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \psi \rangle}_w$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} | \psi \rangle_w = \frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \psi \rangle_t + e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \frac{d}{dt} | \psi \rangle_t$$

$\underbrace{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \psi \rangle_t}_{| \psi \rangle_w} + \frac{i}{\hbar} \hat{H}_s | \psi \rangle_t = \frac{i}{\hbar} \hat{H} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \psi \rangle_w$

$$= \frac{1}{i\hbar} (-\hat{H}^0 | \psi \rangle_w + \hat{H}_w | \psi \rangle_w)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} (-\cancel{\hat{H}^0} + \hat{H}^0 + \hat{H}_w^1) | \psi \rangle_w$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} | \psi \rangle_w = \hat{H}_w^1 | \psi \rangle_w$$

Operatoren  $\hat{F}_w$   
Eigenvektoren  $| \psi \rangle$

} zeitabh. durch ungestörte Ham.op.  $\hat{H}^0$

Zustandsvektoren  $| \psi \rangle_w$  zeitentw. durch Stör.op.  $\hat{H}_w^1$