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

Ehrenfest-Theorem

(Klass: $\frac{dA}{dt} = \{A,H\} + \frac{\partial A}{\partial t}$)

V.2. Zeitentwicklungsoperator

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

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}(t,t_0)\underbrace{|\psi(t_0)\rangle}_{\text{Konstant}} \underset{SG}{\overset{!}{=}} \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

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

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}\hat{U}(t,t_0)}$$ BWGL für $\hat{U}$

Lösung: $$\hat{U}(t,t_0) = \hat{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\,\hat{H}(t')\,\hat{U}(t',t_0)$$

Vereinfachung für Systeme mit $\frac{\partial\hat{H}}{\partial t} = 0$

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

zu zeigen durch Potenzreihen-entwickl. von $\hat{U}$, $[\hat{H}^n,\hat{H}]=0$

Check: $i\hbar\frac{\partial\hat{U}}{\partial t} = \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}}_{\hat{U}}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\right)(i\hbar) = \hat{U}\hat{H} = \hat{H}\hat{U}$

Weitere Eigenschaft von $\hat{U}$:

i) Forderung: Die Norm eines Zustands $|\psi\rangle$ darf nicht von der Zeit abhängen

Grund: Norm $\hat{=}$ Integral über die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $\langle\psi|\psi\rangle = \int dx\, \psi^*(x)\psi(x)$

— Wahrscheinlichkeitserhaltung

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

also:

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle \overset{!}{=} \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

$$\langle\hat{U}\psi(t_0)|\hat{U}\psi(t_0)\rangle \overset{!}{=} \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

$$\langle\psi(t_0)|\hat{U}^+\hat{U}|\psi(t_0)\rangle \overset{!}{=} \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

also muß gelten: $\hat{U}^+(t,t_0)\,\hat{U}(t,t_0) = \hat{1}$

$$\Longleftrightarrow \boxed{\hat{U}^+(t,t_0) = \hat{U}^{-1}(t,t_0)}$$

$\hat{U}$ ist ein unitärer Operator!

speziell für Systeme mit zeitunabhängigem $\hat{H}$ folgt

$$\hat{U}^{-1}(t,t_0) = \left(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}\right)^{-1} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_0-t)}$$

$$= \hat{U}(t_0,t)$$

ii) $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t')|\psi(t')\rangle$

$$= \hat{U}(t,t')\,\hat{U}(t',t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{U}(t,t_0) = \hat{U}(t,t')\,\hat{U}(t',t_0)$$

(iii) Systeme mit Zeittranslationsinvarianz $\Longleftrightarrow$ Energieerhaltung (Noether'sches Theorem)

$$\hat{U}(t,t_0) = \hat{U}(t-t_0)$$

nur Zeitdifferenz ist relevant!

V.3 Zur Konstruktion weiterer Darstellung der Dynamik („Bilder")

Bisher: „Schrödinger-Bild" der Dynamik

- Zustände $|\psi\rangle = |\psi(t)\rangle$ sind zeitabhängig
- Operatoren zu zeitunabhängigen Observablen sind zeitunabhängig
- BWGL: $i\hbar |\dot{\psi}(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$ Schrödingergl. (SG)

Das ist nicht die einzig mögliche Darstellung!

Idee: Die physikalischen Meßgrößen eines Systems, d.h. die Erwartungswerte (und Eigenwerte) bleiben ungeändert bei einer unitären Transformation

sei $|\bar{\psi}\rangle = \hat{U}^{+}|\psi\rangle$; $\hat{\bar{A}} = \hat{U}^{+}\hat{A}\hat{U}$ transformiere Zustände und Operatoren

$$\langle\bar{\psi}|\hat{\bar{A}}|\bar{\psi}\rangle = \langle\hat{U}^{+}\psi|\hat{\bar{A}}|\hat{U}^{+}\psi\rangle = \langle\psi|\hat{U}\,\hat{\bar{A}}\,\hat{U}^{+}|\psi\rangle$$
$$= \langle\psi|\underbrace{\hat{U}\hat{U}^{+}}_{\hat{1}}\hat{A}\underbrace{\hat{U}\hat{U}^{+}}_{\hat{1}}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

Erwartungswert bleibt erhalten, wie gefordert!

(Bemerkung: man hätte auch definieren können: $|\bar{\psi}\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$, $\hat{\bar{A}} = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{+}$)

V. 4. Das Heisenberg-Bild der Dynamik

Konzept: Zustände sind zeitunabhängig, Operatoren sind immer zeitabhängig

Festlegung der Zustände

$$|\psi_H(t)\rangle = |\psi_H\rangle \overset{!}{=} |\psi(t_0)\rangle$$

Heisenberg-Zustand

Zustand im Schrödingerbild zur Zeit t_0

für alle Zeiten t

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

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

Definition der Heisenberg-Observablen:

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

Operator im Schrödingerbild

Zeitentwicklungsoperator im Schrödingerbild

Damit:

$$\langle\psi_H|\hat{A}_H(t)|\psi_H\rangle = \langle\hat{U}^+\psi|\hat{U}^+\hat{A}\hat{U}|\hat{U}^+\psi\rangle$$

Erwartungswert im Heisenbergbild

$$\langle\psi|\underbrace{\hat{U}\hat{U}^+}_{1}\hat{A}\underbrace{\hat{U}\hat{U}^+}_{1}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \quad \text{ok.}$$

BWGL für die Operatoren im Heisenbergbild

(Zustände sind ja zeitlich konstant!)

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = \frac{d}{dt}\left(\hat{U}^+(t,t_0)\hat{A}\,\hat{U}(t,t_0)\right)$$

$$= \frac{\partial\hat{U}^+}{\partial t}\hat{A}\,\hat{U} + \hat{U}^+\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\hat{U} + \hat{U}^+\hat{A}\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}$$

Produktregel

benutze die BWGL für $\hat{U}$ (Kap. V.2.)

$$i\hbar\frac{\partial\hat{U}}{\partial t} = \hat{H}\hat{U} \Rightarrow \frac{\partial\hat{U}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\hat{U}$$

$$\frac{\partial\hat{U}^+}{\partial t} = \left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\hat{U}\right)^+$$

$$= -\frac{1}{i\hbar}\hat{U}^+\hat{H}^+ = -\frac{1}{i\hbar}\hat{U}^+\hat{H}$$

einsetzen:

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = -\frac{1}{i\hbar}\hat{U}^+\hat{H}\hat{A}\,\hat{U} + \hat{U}^+\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\hat{U} + \hat{U}^+\hat{A}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)\hat{H}\hat{U}$$

$$= -\frac{1}{i\hbar}\hat{U}^+\hat{H}\underbrace{\hat{U}\hat{U}^+}_{1}\hat{A}\hat{U} + \hat{U}^+\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\hat{U} + \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^+\hat{A}\underbrace{\hat{U}\hat{U}^+}_{1}\hat{H}\hat{U}$$

benutze: $\hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} = \hat{H}_H(t)$

$\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} = \hat{A}_H(t)$

definiere: $\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}_H(t) := \hat{U}^\dagger \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \hat{U}$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)\right] + \frac{\partial}{\partial t}\hat{A}_H(t)}$$

ersetzt die SG

Bemerkungen

i) Systeme mit zeitunabhängigem $\hat{H}$

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

$$\hat{H}_H(t) = e^{+i/\hbar\, \hat{H}(t-t_0)}\, \underbrace{\hat{H}\, e^{-i/\hbar\, \hat{H}(t-t_0)}}_{\text{vertauscht!}} = 1\,\hat{H} = \underbrace{\hat{H}}_{\text{Hamiltonoperator im Schrödingerbild}}$$

ii) Vergleich mit Ehrenfestschem Theorem

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \underbrace{\frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H}, \hat{A}]\rangle}_{\frac{1}{i\hbar}\langle[A,\hat{H}]\rangle} + \left\langle\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\right\rangle$$

$$\frac{1}{i\hbar}\langle[A,\hat{H}]\rangle + \left\langle\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\right\rangle$$

iii) Folgerung aus der Heisenbergschen BWGL:

falls $\frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} = \hat{U}^\dagger \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\hat{U} = 0$ und $[\hat{A}_H, \hat{H}_H] = \hat{U}^\dagger[\hat{A},\hat{H}]\hat{U} = 0$

$\Rightarrow$ Die Observable ist eine Konstante der Bewegung!

V.5. Dirac-Bild (Wechselwirkungsbild) der Dynamik

steht zwischen Schrödingerbild und Heisenbergbild insofern, als sowohl Zustände als auch Observablen zeitabhängig sind!

Dirac-Bild ist geeignet für Systeme mit Hamiltonoperator der Form

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$$

$\hat{H}_0$: zeitunabhängig, $\frac{\partial \hat{H}_0}{\partial t} = 0$

$\hat{H}_1(t)$: zeitabhängig, z.B. Kopplung an ein zeitlich oszillierendes elektrisches oder magnet. Feld

„Wechselwirkung mit Umgebung"

häufig kann man $\hat{H}_1(t)$ als „klein" betrachten gegenüber $\hat{H}_0$

$\Rightarrow$ $\hat{H}_1$ repräsentiert eine kleine „Störung"

Dirac-Bild hat wichtige Bedeutung bei der Konstruktion einer zeitabhängigen Störungstheorie