1.5 Dynamik im Schrödinger-, Heisenberg-, Wechselwirkungsbild

Betrachte zeitabhängige Zustände $|\psi\rangle_t$:

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

Formale Lösung:

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

Def. über Potenzreihe:

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

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

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

Adjungierte Schrödingergl.

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

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 $\underline{A}(t)$)

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

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

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

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

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 $F(\underline{q},\underline{p},t)$ klass. Obs., $H(\underline{q},\underline{p})$ 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 $F(\underline{q},\underline{p},t)$

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

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

Fundamentalbeziehung der <u>Dynamik der Quantentheorie</u>

- keine Dgl. für $\overset{\circ}{\hat{F}}$, da i.a. $\overset{\circ}{\hat{F}} \neq \frac{d}{dt} F$,
  vielmehr ist $\overset{\circ}{\hat{F}}$ def. über Erwartungswert $\langle \overset{\circ}{\hat{F}} \rangle := \frac{d}{dt} \langle F \rangle$!

speziell gilt:
$$\left.\begin{aligned} \overset{\circ}{\underline{r}} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\underline{r}}] \\ \overset{\circ}{\underline{p}} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\underline{p}}] \end{aligned}\right\} \hat{=} \text{ klass. Hamilton'schen Gln.}$$

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

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. Beweg.gln.

<u>Bilder</u>:

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

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

Für verschiedene, zeitabh. U erhält man verschied. Bilder (im Folgenden sei $\frac{\partial}{\partial t}\hat{F} = 0$) :

(a) Schrödinger-Bild :

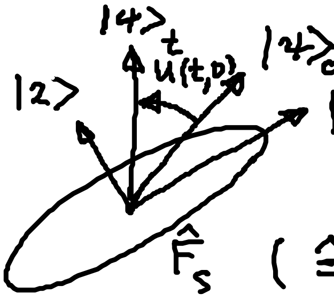
Operatoren $\hat{F}_S(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}})$ zeitunabh.

Eigenvektoren $|n\rangle$ zeitunabh.

Zustandsvektoren $|\psi\rangle_t$ zeitabh.

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

Veranschaulichung im $\mathbb{R}^2$:



$|\psi\rangle_t = U(t,0)|\psi_0\rangle$

$|1\rangle$ Eigenvektor ($\hat{=}$ Hauptachsen)

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

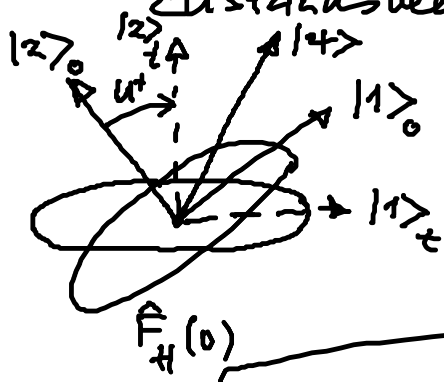
(b) Heisenberg-Bild

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

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

Eigenvektoren $|n\rangle$ zeitabh.

Zustandsvektoren $\boxed{|\psi\rangle = |\psi\rangle_0 = |\psi\rangle_H}$ zeitunabh.



Aus $$\boxed{\hat F_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat H t}\,\hat F_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H t}}$$

folgt $$\frac{d\hat F_H}{dt} = \frac{i}{\hbar}\hat H \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat H t}\,\hat F_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H t}}_{\hat F_H} + \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat H t}\,\hat F_S}_{\hat F_H}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat H\right) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H t}$$

$$\boxed{\frac{d\hat F_H}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[H, \hat F_H\right]}$$ d.h. $\overset{\circ}{F} = \frac{d}{dt}\hat F_H$ im Heisenberg-Bild

Insbesondere:

$\frac{d\hat H_H}{dt} = 0$ also $\boxed{\hat H_H = \hat H_S = \hat H}$ bildunabh.

(c) Wechselwirkungs-Bild
(Dirac-Bild)

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

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

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

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

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

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

$$= \frac{1}{i\hbar}\left(-\hat{H}^0\underbrace{|\psi\rangle_W} + \underline{\hat{H}_W}\,|\psi\rangle_W\right)$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left(-\cancel{\hat{H}^0} + \cancel{\hat{H}^0} + \hat{H}^1_W\right)|\psi\rangle_W$$

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

Operatoren $\hat{F}_W$
Eigenvektoren $|n\rangle$ } zeitabh. durch ungestörten Ham.op. $\hat{H}^0$

Zustandsvektoren $|\psi\rangle_W$ Zeitentw. durch Störop. $\hat{H}^1_W$