$\underline{\text{IX}}$ Alternative Bilder der Quantenmechanik

1. Heisenbergbild

bisher: Schrödingergleichung $i\hbar\, \partial_t |\psi(t)\rangle = \underline{H}\, |\psi(t)\rangle$

Erwartungswerte eines Observablen $\underline{O}$: $\langle \psi(t)|\,\underline{O}\,|\psi(t)\rangle \equiv \langle \underline{O}\rangle(t)$

diese Formulierg. heißt „Schrödingerbild" mit Observablen $\vec{r}, \vec{p}$

Die Zeitabhängigkeit wird von $|\psi(t)\rangle$ getragen, Alternative?

a) Zeitentwicklungsoperator $\underline{U}(t,t_0)$

t_0: Beginn der Dynamik, „S" Schrödingerbild, „H" Heisenbergbild

Ansatz: $|\psi_S(t)\rangle = \underline{U}(t,t_0)|\psi_S(t_0)\rangle$

$\underline{U}$ dann einsetzen in Schrödingergleichung:

$$i\hbar\, \partial_t\, U(t,t_0)|\psi_S(t_0)\rangle = \underline{H}\, \underline{U}(t,t_0)\, |\psi_S(t_0)\rangle$$

gültig für alle $|\psi_S(t_0)\rangle$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar\, \partial_t\, \underline{U}(t,t_0) = \underline{H}\, \underline{U}(t,t_0)}$$ „Dgl. f. Operatoren (Zeitentwicklungsoperator)

$\underline{U}$ ist ein „unitärer" Operator: $\underline{U}^+ = \underline{U}^{-1}$

$\Rightarrow$ Darstellung der $\underline{1}$ Operator $\quad \underline{U}^+\underline{U} = \underline{1} = \underline{U}^{-1}\underline{U}$

formale Lösung:

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

ist leider implizit, $\mathcal{U}(t_0,t_0) = \underline{1}$ am Ansatz f $|\Psi_S(t)\rangle$

Lösung für zeitunabhängiges $\underline{H}$:

$$\underline{\mathcal{U}} = \underline{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H\, \mathcal{U}(t_0,t') = 1 - \frac{i}{\hbar} H \int_{t_0}^{t} dt'\, \mathcal{U}(t_0,t') \qquad (*)$$

0. Ordnung: $\mathcal{U}^{(0)} = \underline{1}$

$\mathcal{U}^{(0)}$ einsetzen auf rechte Seite $(*)$

1. Ordnung: $\underline{\mathcal{U}}^{(1)} = 1 - \frac{i}{\hbar}\underline{H}(t-t_0)$ f. $t_0 = 0$

$\mathcal{U}^{(1)}$ einsetzen auf rechte Seite $(*)$

2. Ordnung: $\mathcal{U}^{(2)} = 1 - \frac{i}{\hbar}\underline{H}\int_0^t dt' \left(1 - \frac{i}{\hbar}\underline{H}t\right)$

$$= 1 - \frac{i}{\hbar}\frac{\underline{H}t}{1} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \underline{H}^2 \frac{t^2}{2}$$

n-te Ordnung: $\underline{\mathcal{U}}^{(n)} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!}\underline{H}^n t^n \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n$

$\rightsquigarrow$ $\underline{\mathcal{U}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{H}\cdot t}$ bzw. $= e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{H}\cdot(t-t_0)}$ $(t_0 \neq 0)$

am besten über Reihendefinition arbeiten!

b) Konstruktion d. Heisenbergbilds

$$|\Psi_S(t)\rangle = \underline{U}(t,t_0)\,|\Psi_S(t_0)\rangle \quad \curvearrowright \quad \underline{U}^{-1}\,|\Psi_S(t)\rangle = |\Psi_S(t_0)\rangle \equiv |\Psi_H\rangle$$

$|\Psi_H\rangle$ ist nicht zeitabhängig!

aber: $\langle \Psi_H | \underline{O}_H | \Psi_H\rangle \overset{!}{=} \langle \Psi_S | \underline{O}_S | \Psi_S\rangle$ Forderung

Bildtransformation: $\underline{O}_S \rightarrow O_H(t) = \underline{U}^{-1}(t,t_0)\,\underline{O}_S\,U(t,t_0)$

$$|\Psi_S(t)\rangle \rightarrow |\Psi_H\rangle = U^{-1}(t,t_0)|\Psi_S(t)\rangle$$

Stelle die Forderung f. Invarianz der EW bei Bildtrafo, zu zeigen:

$$\langle \Psi_H | \underline{O}_H | \Psi_H\rangle = \langle \underline{U}^{-1}\Psi_S | \underline{U}^{-1}\,\underline{O}_S\,\underline{U} \,|\, U^{-1}\Psi_S\rangle \qquad \text{(nach Def)}$$

$$= \langle \Psi_S | (\underline{U}^{-1})^{+}\,\underline{U}^{-1}\,\underline{O}_S\,\underline{U}\,\underline{U}^{-1} | \Psi_S\rangle$$

$$= \langle \Psi_S | \underline{U}\,\underline{U}^{-1}\,\underline{O}_S\,U\,U^{-1} | \Psi_S\rangle$$

$$= \langle \Psi_S | \underline{O}_S | \Psi_S\rangle \quad \checkmark$$

$\rightarrow$ Äquivalenz der Erwartungswerte ist damit bewiesen,

es fehlt, um $\langle \Psi_H | \underline{O}_H(t) | \Psi_H\rangle$ zu berechnen, eine Gleichung f. $\underline{O}_H(t)$

c) Ableitung einer Gleichung f. Operatoren $\underline{O}_H(t)$

$$\frac{d}{dt}\,\underline{O}_H(t) = \frac{d}{dt}\left(\underline{U}^{-1}\,\underline{O}_S\,\underline{U}\right) = \dot{\underline{U}}^{-1}\,\underline{O}_S\,U + \underline{U}^{-1}\,\dot{\underline{O}}_S\,\underline{U} + \underline{U}^{-1}\,\underline{O}_S\,\dot{\underline{U}}$$

Beispiel f. Zeitabhängigkeit eines Schrödingeroperators $\vec{r}, \vec{p}$ nicht zeitabhängig aber $\underline{H}(\vec{r}, \vec{p}, \underbrace{\overline{E}(t)}_{\text{optisches Feld}}) \;\hat{=}\;$ explizite Zeitabhängigkeit

$$\frac{d}{dt}\underline{O}_H(t) = \underbrace{-\frac{1}{i\hbar}\underline{U}^+\underline{H}^+\underline{O}_s U}_{\text{aus adjungierter Gl. f. } \underline{U}} + \underbrace{\underline{U}^{-1}\underline{O}_s\frac{1}{i\hbar}\underline{H}\,\underline{U}}_{\text{aus Dgl. f. } U} + \frac{\partial}{\partial t}\underline{O}_H\Big|_{expl}$$

$\equiv \underline{U}^{-1}\underline{O}_s\underline{U}$

$\underline{H}$ ist $\underline{H}_s$ im Schrödingerbild

$$= -\frac{1}{i\hbar}\left(\underline{U}^+\underline{H}_s\underbrace{\underline{U}\,\underline{U}^{-1}}_{1}\underline{O}_s\underline{U} - \underline{U}^{-1}\underline{O}_s\underline{U}\,\underline{U}^{-1}\underline{H}_s\underline{U}\right) + \frac{\partial}{\partial t}\underline{O}_H\Big|_{expl}$$

$$= -\frac{1}{i\hbar}\left(\underline{H}_H\underline{O}_H - \underline{O}_H\underline{H}_H\right) + \frac{\partial}{\partial t}\underline{O}_H\Big|_{expl}$$

$$\boxed{i\hbar\frac{d}{dt}\underline{O}_H = \left[\underline{O}_H, \underline{H}_H\right] + i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\underline{O}_H\Big|_{expl}}$$

Heisenberggleichung f. Operatoren.

damit kann mit Lösg. f. $\underline{O}_H(t)$ der EW $\langle\psi_H|\underline{O}_H(t)|\psi_H\rangle$ berechnet werden.

2. Zusammenfassung.

Schrödingerbild $\quad i\hbar\,\partial_t|\psi_s(t)\rangle = \underline{H}_s|\psi_s(t)\rangle$

$\dot{\underline{O}}_s(t) = \partial_t\underline{O}_s(t)$ nur f. explizite Zeitabhängigkeit

$\langle\psi_s(t)|\underline{O}_s|\psi_s(t)\rangle = \langle\underline{O}_s\rangle$

Heisenbergbild: $|\psi_H\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle = \text{Konstant}$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \underline{O}_H(t) = [\underline{O}_H, H_H] + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underline{O}_H \Big|_{\text{expl.}}$$

$$\langle \psi_H | O_H(t) | \psi_H \rangle = \langle O_H \rangle$$

Wechselwirkungsbild (I) — Mischung der Zeitabhängigkeiten: $\underline{H} = \underline{H}_0 + \underline{V}$

U_0: über H_0 definiert

$$i\hbar \partial_t |\psi_I(t)\rangle = H_I(t) |\psi_I(t)\rangle$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \underline{O}_I(t) = [\underline{O}_I, H_0] + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} O_I \Big|_{\text{expl.}}$$

X Hilberträume und deren ONB

Motivation

- ~~Lösung~~ Lösung der SG durch Separationsansatz

$$\psi(\vec{r}, t) = f(t)\, \varphi(\vec{r})$$

$$\hat{H} \varphi_n = E_n \varphi_n$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t)\, \varphi_n(\vec{r}) \quad (\exists \text{ ONB?})$$

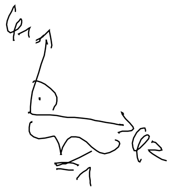
$$\stackrel{?}{=} \sum_{n=1}^{\infty} (\psi, \varphi_n)\, \varphi_n(\vec{r})$$

Definition

▷ Hilbertraum: $\mathbb{K}$-Vektorraum mit Skalarprodukt, in dem jede Cauchyfolge konvergiert

$\mathbb{K} \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$

▷ Orthonormalsystem $\{\varphi_n\}$: $(\varphi_n, \varphi_m) = \delta_{nm}$



Endlich-dim Hilberträume und ONB

Eigenschaften

▷ ONB $\{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$

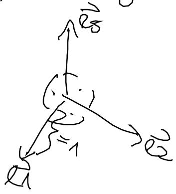
- $\{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$ ONS
- $\forall \varphi \in \mathcal{H} \ \exists!\ a_1, \dots, a_N \in \mathbb{K}: \ \varphi = \sum_{n=1}^{N} a_n \varphi_n$

$\rightarrow$ Zeige: Koeffizienten sind gegeben durch $a_n = (\varphi, \varphi_n)$

Betrachte $\sum_{n=1}^{N} (\varphi, \varphi_n) \varphi_n = \varphi$

Beispiel:

- $\mathcal{H} = \mathbb{R}^3$
- $\forall \vec{r} \in \mathbb{R}^3: \ \vec{r} = x \vec{e}_1 + y \vec{e}_2 + z \vec{e}_3 = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$
- $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$ ONS



$\Rightarrow \{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$ ONB

- $x = (\vec{r}, \vec{e}_1) = \vec{r} \cdot \vec{e}_1$

$\triangleright$ $\{\varphi_1, \ldots, \varphi_N\}$ ONB von $\mathcal{H}$

$\overset{\text{Def.}}{\Rightarrow}$ $\mathcal{H} = \left\{ \sum_{n=1}^{N} a_n \varphi_n : a_1, \ldots, a_N \in \mathbb{K} \right\}$

$=: \operatorname{span}\{\varphi_1, \ldots, \varphi_N\}$

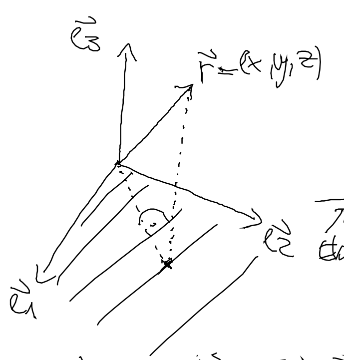
Beispiel 2

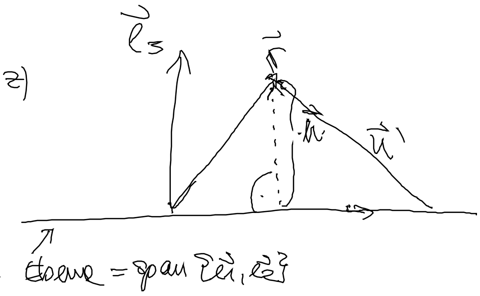
$\mathcal{H} = \mathbb{R}^3$

3-dim $\varphi_1 = \vec{e_1}$

$\varphi_2 = \vec{e_2}$

$\varphi_3 = \vec{e_3}$





$$\vec{u} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ z \end{bmatrix} = \vec{r} - x\vec{e_1} - y\vec{e_2} = \vec{r} - (\vec{r}, \vec{e_1})\vec{e_1} - (\vec{r}, \vec{e_2})\vec{e_2}$$

$$= \vec{r} - \sum_{n=1}^{2} (\vec{r}, \vec{e_n})\vec{e_n}$$

$$\|\vec{u}'\| > \|\vec{u}\| = \underbrace{\Big\| \vec{r} - \sum_{n=1}^{2} (\vec{r}, \vec{e_n})\vec{e_n} \Big\|}_{}$$

kleinste Abstand von $\vec{r}$ zur Ebene = span $\{\vec{e_1}, \vec{e_2}\}$

Proj. von $\vec{r}$ auf span $\{\vec{e_1}, \vec{e_2}\}$

Existenz und Eigenschaften einer ONB im unendlich-dim Hilbertraum

$\{\varphi_n : n \in \mathbb{N}\}$ ONB:

- $\{\varphi_n\}$ ONS
- $\forall \varphi \in \mathcal{H} \; \exists! \, (a_n)_{n \in \mathbb{N}} : \; \varphi = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \varphi_n = \lim_{N \to \infty} \sum_{n=1}^{N} a_n \varphi_n$

→ $a_n = (\varphi, \varphi_n)$

Betrachte $\sum_{n=1}^{\infty} (\varphi, \varphi_n)\varphi_n = \varphi$

→ Wir erhalten, dass alle $\sum_{k=1}^{N_k} (\varphi, \varphi_{n_k})\varphi_{n_k} \in \mathcal{H}$

z.B. $(\varphi,\varphi_5)\varphi_5 + (\varphi,\varphi_1)\varphi_1 + \dots$

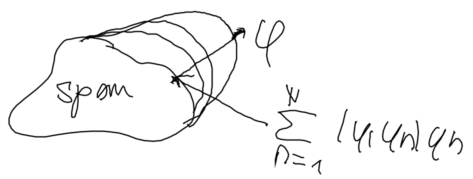
→ Betrachte $\sum_{n=1}^{N} (\varphi,\varphi_n)\varphi_n$

→ Wann wird Abstand $\|\varphi - \sum_{n=1}^{N} (\varphi,\varphi_n)\varphi_n\|$ klein?

Weiter mit Beispiel 2

$$\vec{r} - \sum_{n=1}^{3} (\vec{r}, \vec{e}_n)\vec{e}_n = 0$$

$\sum_{n=1}^{N} (\varphi,\varphi_n)\varphi_n$ Proj. von φ auf span$\{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$



$$\varphi = \lim_{N\to\infty} \sum_{n=1}^{N} (\varphi,\varphi_n)\varphi_n$$