

3. Zeitentwicklung

Die Quantenmechanik ist eine nicht-relativistische Theorie, in der Zeit und Raum unterschiedlich voneinander behandelt werden. Insbesondere bleibt Zeit ähnlich wie in der klassischen Mechanik ein reines Parameter. Zeit wird nicht zu einem Operator erhoben.

Damit stößt die Quantenmechanik an ihre Grenzen, sobald Propagationen oder Teilchen-trajektorien etc. relativistisch werden.

Die Vereinigung von Quantenmechanik und spezieller Relativitätstheorie in einer "relativistischen Quantenmechanik" führt in der Tat zu keiner wirklich konsistenten Theorie. Diese Vereinigung gelingt erst, wenn man die Freiheitsgrade eines quantenmechanischen Punktteilchens aufgibt und zu Feldfreiheitsgraden übergeht. Dies führt dann zu relativistischen Quantenfeldtheorien (in denen

Orte wieder zu reinen Parametern werden).

Im Folgenden beschränken wir uns auf die nicht-relativistische Quantenmechanik und wollen die Zeitentwicklung von Zuständen verstehen, sind also auf der Suche nach dem quantenmechanischen Analogon zum 2. Newton'schen Gesetz.

3.1 Zeitentwicklungsoperator

Sei ein physikalisches System zum Zeitpunkt t_0 in einem Zustand $|\psi\rangle$. Im Allgemeinen erwarten wir, dass es zu einem späteren Zeitpunkt nicht mehr im gleichen Zustand ist, sondern in einem neuen Zustand

$$|\psi, t\rangle \quad \text{mit} \quad |\psi, t=t_0\rangle = |\psi\rangle. \quad (3.1)$$

Für die Zeitentwicklung von t_0 nach t führen wir einen Operator $U(t, t_0)$ ein:

$$|\psi, t\rangle = U(t, t_0) |\psi, t_0\rangle. \quad (3.2)$$

Wahrscheinlichkeitserhaltung der Zeitentwicklung verlangt,
dass ein normierter Zustand normiert bleibt;

$$1 = \langle \psi, t_0 | \psi, t_0 \rangle \Rightarrow 1 = \langle \psi, t | \psi, t \rangle = \langle \psi, t_0 | U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) | \psi, t_0 \rangle \quad (3.2)$$

Da $|\psi, t_0\rangle$ beliebig ist, folgt, dass U unitär sein
muss:

$$U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) = \mathbb{1}. \quad (3.3)$$

Da eine Zeitentwicklung von t_0 nach t_1 und dann
von t_1 nach t_2 einer Zeitentwicklung von t_0 nach t_2
entsprechen soll, gilt:

$$U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1) U(t_1, t_0) \quad (t_2 > t_1 > t_0) \quad (3.4)$$

Betrachten wir infinitesimale Zeitentwicklungen,

$$|\psi, t_0 + dt\rangle = U(t_0 + dt, t_0) |\psi, t_0\rangle, \quad (3.5)$$

dann soll U nur infinitesimal von der Identität
verschieden sein, und im Limes in diese übergehen:

$$\lim_{dt \rightarrow 0} U(t_0 + dt, t_0) = \mathbb{1}. \quad (3.6)$$

Analog zu den räumlichen Translationen erfüllt folgende Parametrisierung diese Eigenschaften:

$$U(t_0 + dt, t_0) = 1 - i \Omega dt \quad (3.7)$$

mit $\Omega = \Omega^\dagger$ hermitisch (wegen Unitarität von U).

Die physikalische Bedeutung von Ω entnehmen wir wieder aus der Analogie zur klassischen Mechanik: hier ist die Hamilton-Funktion die Erzeugende der Zeitentwicklung, wie man im Vergleich mit den kanonischen Bewegungsgleichungen sieht:

$$\left. \begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\partial H}{\partial p} = \{x, H\} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial x} = \{p, H\} \end{aligned} \right\} \text{klassisch} \quad (3.8)$$

Da der Operator Ω in (3.7) aber die Dimension eines Frequenz trägt, benötigen wir einen Vorfaktor der Dimension "Wirkung". Wir wählen

$$\Omega = \frac{H}{\hbar} \quad (3.9)$$

was sich nur experimentell verifizieren lässt. In der Tat ist dieser Zusammenhang vertraut vom Photoeffekt, bei dem die Energie-Frequenz-Relation $E = \hbar \omega$ nachgewiesen wird.

Damit wird der infinitesimale Zeitentwicklungsoperator zu

$$U(t_0 + dt, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} H dt. \quad (3.10)$$

Die klassische Hamilton-Funktion ist somit zum hermiteschen Operator erhoben worden, $H = H^\dagger$, welches die Zeitentwicklung eines Systems erzeugt. Damit lässt sich die wichtige

Gleichung der Quantenmechanik ableiten, welche die Zeitentwicklung von Zuständen beschreibt:

3.2 Schrödinger - Gleichung

Wir betrachten die Zeitentwicklung eines Systems von t_0 nach t und dann nach dt . Aus (3.4) folgt infinitesimal

$$U(t+dt, t_0) = U(t+dt, t) U(t, t_0) = \left(1 - \frac{iH}{\hbar} dt\right) U(t, t_0)$$

$$\Rightarrow U(t+dt, t_0) - U(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} H dt U(t, t_0) \quad (3.11)$$

Im Limes $dt \rightarrow 0$ geht die linke Seite (geteilt durch dt) in eine Ableitung über:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H U(t, t_0) \quad (3.12)$$

Dies ist die Schrödinger-Gleichung für den

Zeitentwicklungsoperator. Sie liegt allen Zeitentwicklung in der Quantenmechanik zugrunde.

Wenden wir (3.12) z.B. auf einen Zustand

zum Zeitpunkt t_0 an, so folgt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) |\psi, t_0\rangle = H U(t, t_0) |\psi, t_0\rangle$$

$$\Rightarrow \underline{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle = H |\psi, t\rangle}, \quad (3.13)$$

Die Schrödinger-Gleichung für Zustände. Allerdings genügt die Kenntnis der Zeitentwicklung für den Zeitentwicklungsoperator, d.h. die Lösung von (3.12), um die gesamte Zeitentwicklung des Systems abzuleiten.

Wir benötigen daher formale Lösungen der Schrödinger-Gleichung (3.12). Hierzu betrachten wir drei Fälle:

1. Fall: Der Hamilton-Operator ist zeitunabhängig,
 $H = \text{const.}$ In diesem Fall können wir $U(t, t_0)$

analog zu den endlichen Translationen in (2.101) konstruieren:

Sei $t - t_0 = N \cdot dt$ im Limes $N \rightarrow \infty$, $dt \rightarrow 0$,
 $t - t_0 = \text{const}$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \underline{U(t, t_0)} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^N U(t_0 + dt, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i}{\hbar} H\left(\frac{t-t_0}{N}\right)\right)^N \\ &= \underline{e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)}} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Dies lässt sich auch direkt anhand der Taylor-Entwicklung der e -Funktion verifizieren.

Fall 2: Der Hamilton-Operator ist zeitabhängig, aber H 's zu verschiedenen Zeiten sind kompatibel,

$$[H(t_1), H(t_2)] = 0 \quad \text{für alle } t_1, t_2 \quad (3.15)$$

Die formale Lösung ist dann

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t')} \quad (3.16)$$

was sich wieder durch Anwendung der Ableitung auf die Taylor-Entwicklung Ordnung für Ordnung

zeigen lässt.

Fall 3: Der Hamilton-Operator zu verschiedenen Zeiten kommutiert nicht, $[H(t_1), H(t_2)] \neq 0$ i. A. für $t_1 \neq t_2$.

(z.B. der Hamilton-Operator eines $\text{Spin-}\frac{1}{2}$ Teilchens im Magnetfeld hat einen Anteil $H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\frac{e}{mc} \vec{S} \cdot \vec{B}$ mit $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$. Falls $\vec{B} = \vec{B}(t)$ zeitabhängig die Richtung ändert, z.B. $\vec{B}(t_0) = B \hat{e}_x$ und $\vec{B}(t_1) = B \hat{e}_y$, dann kommutieren die jeweiligen Hamilton-Operatoren nicht, weil $[S_x, S_y] \neq 0$.)

Eine formale Integration von (3.12) liefert

$$U(t, t_0) - \underbrace{U(t_0, t_0)}_{=1} = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') U(t', t_0) \quad (3.17)$$

$$\Rightarrow U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') U(t', t_0). \quad (3.18)$$

Diese Gleichung lässt sich iterieren:

$$\begin{aligned} \underline{U(t, t_0)} &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' H(t') \int_{t_0}^{t'} dt'' H(t'') U(t'', t_0) \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \dots \int_{t_0}^{t^{(n-1)}} dt^{(n)} H(t') H(t'') \dots H(t^{(n)}) \end{aligned} \quad (3.19)$$

Diese Darstellung wird auch Dyson-Reihe genannt und bildet eine Grundlage für zeitabhängige Störungstheorie und Streutheorie (vgl. QM II).

In den elementaren Beispielen dieses Vorlesung beschäftigen wir uns weitestgehend mit Fall 1: zeitunabhängigen Hamilton-Operatoren.

3.3 Energieeigenzustände

Zum Studium der Zeitabhängigkeit und Zeitentwicklung eines Zustands $|\psi, t\rangle$ betrachten wir eine

Basis $\{|a'\rangle\}$ von Eigenkets eines Operators A , der mit dem Hamilton-Operator kompatibel sein soll

$$[A, H] = 0 \quad (3.20)$$

Dann sind die Eigenkets $|a'\rangle$ mit

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle \quad (3.21)$$

Simultane Eigenkets von H , also Energieeigenzustände,

$$H |a'\rangle = E_{a'} |a'\rangle \quad (3.22)$$

mit Energieeigenwert $E_{a'}$. Hier und in Folgenden seien stets zeitunabhängige Hamilton-Operatoren betrachtet. In der $\{|a'\rangle\}$ -Basis lässt sich der Zeitentwicklungsoperator dann wie folgt darstellen (sei $t_0 = 0$)

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} &= \sum_{a', a''} |a''\rangle \langle a''| e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |a'\rangle \langle a'| \\ &= \sum_{a'} |a'\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_{a'} t} \langle a'| \end{aligned} \quad (3.23)$$

Sei $|\Psi, t_0\rangle$ ein Zustand zum Zeitpunkt t_0 mit

$$|\Psi, t_0\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \underbrace{\langle a' | \Psi, t_0 \rangle}_{c_{a'}(t_0)} \equiv \sum_{a'} c_{a'}(t_0) |a'\rangle \quad (3.24)$$

mit Entwicklungskoeffizienten $c_{a'}$. Die Zeitentwicklung liefert nun zum Zeitpunkt t den Zustand

$$\begin{aligned} |\Psi, t\rangle &= U(t, t_0) |\Psi, t_0\rangle \stackrel{(3.23)}{=} \sum_{a'} |a'\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_{a'} t} \langle a' | \Psi, t_0 \rangle \\ &= \sum_{a'} |a'\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_{a'} t} c_{a'}(t_0) \equiv \sum_{a'} |a'\rangle c_{a'}(t) \end{aligned} \quad (3.25)$$

D.h. die Entwicklungskoeffizienten evolvieren in der Zeit gemäß

$$c_{a'}(t) = c_{a'}(t_0=0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{a'} t} \quad (3.26)$$

Das heißt, die Zeitevolution des Koeffizienten besteht nur in einer Phasenänderung, während die Beträge gleich bleiben. Ein spezieller Fall ergibt sich, wenn der Anfangszustand ein Energieeigenzustand ist, z.B.

$$|\psi, t_0=0\rangle = |a'\rangle$$

$$\Rightarrow |\psi, t\rangle = |a'\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_{a'} t} \quad (3.27)$$

Falls also das System in einem Energieeigenzustand zum Zeitpunkt t_0 ist, bleibt es für alle Zeiten in diesem Zustand. Man spricht daher auch von stationären Zuständen.

Die zugehörige kompatible Observable A liefert bei Messung zu allen Zeitpunkten den Messwert a' . Eine mit H kompatible Observable kann daher als "Konstante der Bewegung" betrachtet werden, bzw. als Erhaltungsgröße.

Daraus ergibt sich folgendes Rezept zur Lösung von Zeitentwicklungsproblemen: Finde alle, d.h. einen vollständigen Satz von zueinander kompatiblen

Observablen A, B, C, \dots mit $[A, B] = [B, C] = [A, C] = \dots = 0$

und $[H, A] = [H, B] = [H, C] = \dots = 0$. In

der zugehörigen simultanen Eigenbasis $\{|K'\rangle\}$

$= \{|a', b', c', \dots\rangle\}$ lautet dann die Zeitentwicklung

$$e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = \sum_{K'} |K'\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_{K'} t} \langle K'|. \quad (3.28)$$

Damit lassen sich alle Zustände zu allen Zeiten bestimmen.

3.4 Beispiel : Spin-Präzession

Als einfaches Beispiel diskutieren wir Spin-Präzession in einem konstanten Magnetfeld für ein Spin $-\frac{1}{2}$ Teilchen mit magnetischem Moment

$$\vec{\mu} = \frac{e}{mc} \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} = \frac{e}{mc} \vec{S}. \quad (3.29)$$

Der Hamilton-Operator lautet

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\frac{e}{mc} \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}. \quad (3.30)$$

Sei $\vec{B} = B \hat{e}_z = \text{const}$ und homogen:

$$H = -\frac{eB}{mc} \frac{\hbar}{2} \sigma_3 \equiv -\frac{eB}{mc} S_z \quad (3.31)$$

d.h. H und S_z sind bis auf einen konstanten Faktor identisch

$$\Rightarrow [H, S_z] = 0. \quad (3.32)$$

Es gibt eine simultane Eigenbasis, nämlich die

$|\pm\rangle \equiv |S_z; \pm\rangle$ Basis. Die entsprechenden Energieeigenwerte lauten dann

$$E_{\pm} = \mp \frac{e\hbar B}{2mc} \quad \text{für } |\pm\rangle. \quad (3.33)$$

Wir definieren die Frequenz

$$\omega = \frac{|e|\hbar B}{mc} \quad \text{mit } e < 0 \text{ für ein Elektron,} \quad (3.34)$$

so dass

$$H = \omega S_z. \quad (3.35)$$

Der Zeitentwicklungsoperator lautet entsprechend

$$U(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} S_z \omega t}. \quad (3.36)$$

Ein beliebiger Zustand $|\gamma\rangle$ lautet in der S_z

Basis

$$|\gamma\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle. \quad (3.37)$$

Sei $|\gamma, t_0=0\rangle \equiv |\gamma\rangle$. So ist das System

zum Zeitpunkt t im Zustand

$$|y, t\rangle = U(t, 0) |y\rangle = \underbrace{c_+}_{c_+(t)} e^{-\frac{i}{2}\omega t} |+\rangle + \underbrace{c_-}_{c_-(t)} e^{\frac{i}{2}\omega t} |-\rangle, \quad (3.38)$$

Weil $H | \pm \rangle = \pm \frac{\hbar\omega}{2} | \pm \rangle$, (3.39)

Sei z.B. $|y\rangle = |+\rangle$, d.h. $c_+ = 1$, $c_- = 0$

in einem Spin-up Zustand. Dann bleibt

das System zu allen Zeiten in einem Spin-up

Zustand, da $c_+(t) = e^{-\frac{i}{2}\omega t} \Rightarrow |c_+(t)|^2 = 1$

und $c_-(t) = 0$.

Falls aber z.B. $|y\rangle = |S_x; +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle$, (3.40)

verhält der Zustand nicht stationär im

$|S_x; +\rangle$ Zustand. Dies lässt sich ablesen

an der Wahrscheinlichkeit zum Zeitpunkt t mit

einem S_{G_x} Apparat den Zustand $|S_x; \pm\rangle$

Zu messen:

$$\begin{aligned}
 |\langle S_x; \pm | \gamma, t \rangle|^2 &= \left| \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \langle + | \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \langle - | \right\} \cdot \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{i}{2}\omega t} | + \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{i}{2}\omega t} | - \rangle \right\} \right|^2 \\
 &= \left| \frac{1}{2} \left(e^{-\frac{i}{2}\omega t} \pm e^{\frac{i}{2}\omega t} \right) \right|^2 \\
 &= \begin{cases} \cos^2 \frac{\omega t}{2} & \text{für } S_x' = +\frac{\hbar}{2} \\ \sin^2 \frac{\omega t}{2} & \text{für } S_x' = -\frac{\hbar}{2} \end{cases} \quad (3.41)
 \end{aligned}$$

Wie erwartet ist die Wahrscheinlichkeit $S_x' = +\frac{\hbar}{2}$ zu messen $= 1$ zum Zeitpunkt $t=0$. Umgekehrt bei $\omega t = \pi$ ist die Wahrscheinlichkeit $S_x' = -\frac{\hbar}{2}$ zu messen $= 1$.

Die Wahrscheinlichkeiten oszillieren mit der Frequenz $\frac{\omega}{2}$. Ihre Summe ist $= 1$ wie es sein soll.

Der Erwartungswert einer S_x Messung ergibt bezüglich des Zustands $|\gamma, t\rangle$:

$$\begin{aligned}
 \underline{\langle S_x \rangle} &= \frac{1}{2} \left(e^{\frac{i}{2}\omega t} \langle + | + e^{-\frac{i}{2}\omega t} \langle - | \right) \frac{\hbar}{2} (| + \rangle \langle - | + | - \rangle \langle + |) \left(e^{\frac{i}{2}\omega t} | + \rangle + e^{-\frac{i}{2}\omega t} | - \rangle \right) \\
 &= \frac{\hbar}{2} \frac{1}{2} \left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t} \right) = \underline{\underline{\frac{\hbar}{2} \cos \omega t}} \quad (3.42)
 \end{aligned}$$

Der Erwartungswert oszilliert also mit Frequenz ω zwischen den beiden Eigenwerten $\pm \frac{\hbar}{2}$ hin und her.

Die Frequenz der Oszillation ist durch die Differenz der beiden Energieniveaus gegeben:

$$\omega = \frac{1}{\hbar} (E_+ - E_-) \quad \text{vgl. (3.39)} \quad (3.43)$$

Ähnlich folgt $\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \omega t$, $\langle S_z \rangle = 0$.

Der (Erwartungswert des) Spin präzessiert also in der xy Ebene analog zur Präzession eines klassischen Magnetischen Moments.

3.5 Zeitentwicklungsbilder

Wir haben räumliche Translationen und Zeitentwicklung als Operatoren eingeführt, die Zustandsvektoren in räumliche oder zeitlich verschobene Zustandsvektoren überführt:

$$|\psi\rangle \rightarrow U|\psi\rangle \quad (3.44)$$

mit $U = T(d\vec{x})$ oder $U = U(t, t_0)$. Da der Zustandsvektor ein System beschreibt, bedeuten diese Verschiebungen eine tatsächliche ("aktive") Änderung des Systems.

Wenn wir allerdings Übergangsamplituden betrachten, fällt die Verschiebung wieder heraus, wenn der zugehörige Operator unitär ist:

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle \rightarrow \langle\psi_1|\underbrace{U^\dagger U}_{=1}|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\psi_2\rangle. \quad (3.45)$$

Betrachten wir allerdings ein Produkt der Form

$$\langle\psi_1|X|\psi_2\rangle \rightarrow \langle\psi_1|U^\dagger X U|\psi_2\rangle \quad (3.46)$$

mit beliebigem Operator X , dann lässt sich dies in zwei verschiedenen Weisen lesen:

Zugang 1: "aktiv"

Zustände werden verschoben, Operatoren bleiben

$$|\psi\rangle \rightarrow U|\psi\rangle \quad X \rightarrow X \quad (3.47)$$

Zugang 2: "passiv"

Zustände bleiben, Operatoren werden verschoben

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle \quad X \rightarrow U^\dagger X U \quad (3.48)$$

Zugang 2 mag zunächst künstlich erscheinen; denn z.B. bei einer Translation verschiebt sich nicht der Zustand, sondern es verschiebt sich z.B. der Ortsoperator (und die zugehörige Basis der Eigenvektoren), der eine Meßapparatur symbolisiert:

Beispiel: infinitesimale Translation

$$\text{Zugang 1: } |\psi\rangle \rightarrow \left(1 - \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot d\vec{x}'\right) |\psi\rangle, \quad \vec{x} \rightarrow \vec{x}$$

$$\text{Zugang 2: } |\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle,$$

$$\vec{x} \rightarrow T(d\vec{x}') \vec{x} T^\dagger(d\vec{x}') = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot d\vec{x}'\right) \vec{x} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot d\vec{x}'\right)$$

$$= \vec{x} + \frac{i}{\hbar} [\vec{p} \cdot d\vec{x}', \vec{x}] + \mathcal{O}(d\vec{x}'^2)$$

$$\approx \vec{x} + d\vec{x}' \cdot \mathbb{1} \quad (3.49)$$

Per constructionem ist klar, dass die Werte von Wahrscheinlichkeitsamplituden etc. nicht von der Lesart 1 oder 2 abhängen. Die Transformationen als aktiv oder passiv aufzufassen ist also ohne physikalische Bedeutung. Wir sprechen also lediglich von unterschiedlichen Bildern.

Zugang 2 ist deswegen interessant, weil es eine direktere Annäherung an den klassischen Grenzfall erlaubt. In der klassischen Physik sprechen wir nicht von Zuständen.

Translationen in der klass. Physik ändern z.B. die Ortskoordinate \vec{x} eines Systems, verschieben also diese Größen, die in der QM Operatoren entsprechen.

Für den Fall von Zeitentwicklung $U = U(t, t_0)$ sprechen wir von Zugang 1 als Schrödinger-Bild und von Zugang 2 als Heisenberg-Bild.

Sei $t_0 = 0$ die Anfangszeit. Beschränken wir uns auf zeitunabhängige Hamilton-Operatoren, so lautet der Zeitentwicklungsoperator:

$$U(t) \equiv U(t, t_0=0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \quad (3.50)$$

Zu einer gegebenen Observable $A^{(s)} \equiv A$ im Schrödingerbild definieren wir die Observable im Heisenberg-Bild gemäß Regel 2:

$$A_{(t)}^{(H)} = U^\dagger(t) A^{(s)} U(t) \quad (3.51)$$

Zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ stimmen beide Bilder überein, $A^{(H)}(t=0) = A^{(s)}$. Zu einem späteren Zeitpunkt hat sich im Schrödingerbild der Zustand aus dem Anfangszustand herausentwickelt,

$$|\psi, t\rangle^{(s)} = U(t) |\psi, t_0=0\rangle, \quad (3.52)$$

während der Heisenberg-Zustand gleich bleibt,

$$|\psi, t\rangle^{(H)} = |\psi, t_0=0\rangle. \quad (3.53)$$

Per constructionem sind allerdings Erwartungs-

Werte Bild-unabhängig:

$$\begin{aligned} {}^{(S)} \langle \psi, t | A^{(S)} | \psi, t \rangle^{(S)} &= \langle \psi | U^\dagger(t) A^{(S)} U(t) | \psi \rangle \\ &\stackrel{(3.51)}{=} \stackrel{(3.53)}{=} \langle \psi, t | A^{(H)}(t) | \psi, t \rangle^{(H)}. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Im Heisenberg-Bild muss man die Zeitentwicklung anhand der Operatoren studiert werden; sei $A = A^{(S)}$ explizit zeitabh.:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A^{(H)}(t) &= \frac{\partial U^\dagger(t)}{\partial t} A^{(S)} U(t) + U^\dagger(t) A^{(S)} \frac{\partial U(t)}{\partial t} \\ &= -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger H A^{(S)} U + \frac{1}{i\hbar} U^\dagger A^{(S)} H U \\ &= -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger H U \underbrace{U^\dagger A^{(S)} U}_{= A^{(H)}(t)} + \frac{1}{i\hbar} \underbrace{U^\dagger A^{(S)} U}_{= A^{(H)}(t)} U^\dagger H U \\ &= -\frac{i}{\hbar} [A^{(H)}(t), U^\dagger H U] \end{aligned} \quad (3.55)$$

wobei wir die Schrödinger-Gleichung und ihr komplex konjugiertes verwendet haben:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} H U \quad , \quad \frac{\partial U^\dagger}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} U^\dagger H \quad , \quad H = H^\dagger. \quad (3.56)$$

Da wir den Hamilton-Operator H als zeitunabh. annehmen,
gilt

$$U^\dagger H U = U^\dagger U H = H, \quad (3.57)$$

dass heißt, der Heisenberg-Hamilton-Operator in (3.55)
ist gleich dem Schrödinger-Operator

$$U^\dagger H U \equiv H^{(H)} = H. \quad (3.58)$$

Damit erhalten die Bewegungsgleichung für Heisenberg-Operatoren:

$$\frac{dA^{(H)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [A^{(H)}, H] \quad \text{Heisenberg-Bewegungsgleichung} \quad (3.59)$$

Diese Gleichung ist vollständig analog zur Bewegungsgleichung im Hamilton-Formalismus der klass. Mechanik.

Wählen wir z.B. $A^{(H)} = X^{(H)}$ oder $P^{(H)}$, so

erhalten wir

$$\frac{dX^{(H)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [X^{(H)}, H], \quad \frac{dP^{(H)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [P^{(H)}, H]. \quad (3.60)$$

Ersetzen wir die Kommutatoren durch Poisson-Klammern:

$$-\frac{i}{\hbar} [,] \rightarrow \{ , \}_{\text{Poisson}} \quad (3.61)$$

so erhalten wir die klass. hamiltonischen Bewegungsgleichungen. Die Ersetzung (3.61) kann man als klassischen Limes der Quantenmechanik betrachten.

Während der klassische Limes allerdings nur Sinn macht für Phasenraumobservable $A^{(H)} = A^{(H)}(q^{(H)}, p^{(H)})$, gilt die Heisenberg-Bewegungsgleichung (3.59) auch für Observable ohne klassisches Pendant (z.B. für die Zeitentwicklung des Spins).

3.6 Freies Teilchen & Ehrenfest - Theorem

Da die Quantenmechanik grundlegender ist als die klassische Mechanik, können wir letztere aus erster folgern - nicht umgekehrt (somit beschreibt (3.61) die richtige Richtung und nicht (2.103)).

Um ein quantenmechanisches System zu definieren, können wir uns aber von der Analogie zur klass. Mechanik leiten lassen. Eine klass. Hamilton-Funktion können wir z.B. zum Hamilton-Operator erheben, indem wir die Phasenraumvariable x und p durch Operatoren ersetzen, die den fundamentalen Kommutatoren (2.102) gehorchen.

(Dies muss allerdings nicht immer eindeutig sein; verschiedene Anordnungen von Operatoren können zu verschiedenen physikalischen Systemen führen).

In Analogie zur klass. Mechanik definieren wir also den Hamilton-Operator eines freien

Teilchens:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (3.62)$$

wobei m die Masse des Teilchens bezeichnet.

Für die folgenden Rechnungen benutzen wir die in den Übungen gezeigten Regeln:

$$[x_i, F(\vec{p})] = i\hbar \frac{\partial F(\vec{p})}{\partial p_i}, \quad [p_i, G(\vec{x})] = -i\hbar \frac{\partial G(\vec{x})}{\partial x_i}. \quad (3.63)$$

Wir arbeiten nun im Heisenberg-Bild (lassen aber das Superskript (H) weg) und studieren die Zeitentwicklung von x und p :

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [p_i, H] = 0, \quad (3.64)$$

d.h. \vec{p} ist eine Bewegungskonstante

$$\vec{p}(t) = \vec{p}(0). \quad (3.65)$$

Für den Ortsoperator im Heisenberg-Bild folgt:

$$\frac{dx_i}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [x_i, H] = -\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} \frac{\partial}{\partial p_i} p^2 = \frac{p_i}{m} \stackrel{(3.65)}{=} \frac{p_i(0)}{m} \quad (3.66)$$

Die Lösung von (3.66) lautet

$$x_i(t) = x_i(0) + \frac{p_i(0)}{m} t \quad (3.67)$$

Dies ähnelt der klassischen Trajektorie eines freien Teilchens, beschreibt aber die Zeitentwicklung von Operatoren. So gilt z.B., dass zwar Ortsoperatoren zu gleichen Zeiten kompatibel sind,

$$[x_i(0), x_j(0)] = 0, \quad (3.68)$$

dass aber zu verschiedenen Zeiten Inkompatibilitäten entstehen:

$$\begin{aligned} [x_i(t), x_j(0)] &= [x_i(0) + \frac{p_i(0)}{m} t, x_j(0)] \\ &= \frac{t}{m} [p_i(0), x_j(0)] = -i\hbar \frac{t}{m} \delta_{ij} \quad (3.69) \end{aligned}$$

Dies impliziert eine Unschärfebeziehung,

$$\langle (\Delta x_i(t))^2 \rangle \langle (\Delta x_i(0))^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2} \quad (3.69)$$

Dies zeigt: Selbst wenn das freie Teilchen zum Zeitpunkt $t_0=0$ sehr gut lokalisiert war, wird seine Ortsbestimmung mit der Zeit unschärf. Das zugehörige Wellenpaket "zerfließt" also.

Betrachten wir nun zusätzlich ein Potential $V(\vec{x})$,

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}). \quad (3.70)$$

Nun ist der Impuls keine Konstante mehr,

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [p_i, V(\vec{x})] = -\frac{1}{\hbar} \hbar \frac{\partial V(\vec{x})}{\partial x_i} = -(\vec{\nabla} V(\vec{x}))_i. \quad (3.71)$$

Für den Ortsoperator gilt weiterhin

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{p_i}{m}, \quad (3.72)$$

so dass wir folgen können, dass

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = \frac{1}{m} \frac{dp_i}{dt} = -\frac{1}{m} (\vec{\nabla} V(\vec{x}))_i \quad (3.73)$$

$$\Rightarrow \underline{m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = - \vec{\nabla} V(\vec{x})} . \quad (3.74)$$

Dies ist das quantenmechanische Analogon (im Heisenberg-Bild!!) des 2. Newtonschen Gesetzes.

Bilden wir nun Erwartungswerte, so wird das Resultat Bild-unabhängig,

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \vec{x} \rangle = \frac{d \langle \vec{p} \rangle}{dt} = - \langle \vec{\nabla} V(\vec{x}) \rangle . \quad (3.75)$$

Hierbei haben wir angenommen, dass der Zustand zeitunabhängig ist. Dies ist das Ehrenfest-Theorem. Die Gleichung ist " \hbar -frei" und beschreibt die zeitliche Entwicklung des mittleren Ortes z.B. eines Wellenpakets.

Die Gleichung ist nicht vollständig klassisch, denn i.A. gilt $\langle \vec{\nabla} V(\vec{x}) \rangle \neq \vec{\nabla} V(\langle \vec{x} \rangle)$. Die Zeitentwicklung des Erwartungswerts des Ortes ist also i.A. nicht gleich der Trajektorie eines klassischen Teilchens. Die Unterschiede sind rein quantenmechanisch.

Betrachten wir also die rechte Seite des Ehrenfest-Theorems im Ortsraum bezügl. eines Zustands $|\psi\rangle$

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{\nabla} V(\vec{x}) \rangle &= \langle \psi | \vec{\nabla} V(\vec{x}) | \psi \rangle \\
 &= \int dx' \langle \psi | x' \rangle \langle x' | \vec{\nabla} V(\vec{x}) | \psi \rangle \\
 &= \int dx' \psi^*(x') \vec{\nabla} V(x') \psi(x') \\
 &= \int dx' |\psi(x')|^2 \vec{\nabla} V(x') \quad (3.76)
 \end{aligned}$$

Wenn wir annehmen, dass $\psi(x')$ nur stark lokalisiert ist, ~~so~~ dass sich $\vec{\nabla} V(x')$ über die Ausdehnung des Wellenpakets wenig ändert, so können wir näher:

$$\langle \vec{\nabla} V(\vec{x}) \rangle \simeq \vec{\nabla} V(\bar{x}) \int dx' |\psi(x')|^2 = \vec{\nabla} V(\bar{x}), \quad (3.77)$$

wobei \bar{x} den Ort bezeichnet, um den $\psi(x')$ lokalisiert ist. Mit gleichen Argumenten gilt

$$\bar{x} \simeq \langle \vec{x} \rangle \text{ aufgrund der angenommenen}$$

Lokalisierung. Damit erhalten wir das 2. Newtonsche Gesetz als Grenzfall der Quantenmechanik:

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \vec{x} \rangle \approx -\vec{\nabla} V(\langle \vec{x} \rangle), \quad (3.78)$$

und können die klassische Koordinate $\vec{x}(t)|_{\text{klassisch}}$ als quantenmechanischen Erwartungswert interpretieren.

(NB: die oben geforderte starke Lokalisierung ist nicht unproblematisch, da wegen der Unschärferelation der Impuls unsharp und damit nicht-klassisch wird.

Neben der Forderung der Lokalisierung auf Skalen, auf denen sich $\nabla V(\vec{x})$ wenig ändert, muss also noch angenommen werden, dass die typischen Teilchenimpulse sehr viel größer als die durch die Lokalisierung bedingte Impulsunschärfe sind. Erst dann ergibt sich quasi-klassisches Verhalten.)

3.7 Schrödinger-Gleichung im Ortsraum

Wir haben die Schrödinger-Gleichung als Differentialgleichung für den Zeitentwicklungsoperator kennen gelernt:

$$(3.72): \quad \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} H U(t, t_0), \quad (3.79)$$

bzw. in Anwendung auf einen beliebigen Zustand $|\psi, t_0\rangle$:

$$\begin{aligned} |\psi, t\rangle &= U(t, t_0) |\psi, t_0\rangle \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle &= -\frac{i}{\hbar} H |\psi, t\rangle \end{aligned} \quad (3.80)$$

Wir wollen nun eine Darstellung der Schrödinger-Gleichung für die Wellenfunktion im Ortsraum ableiten

$$\Psi(\vec{x}, t) = \langle \vec{x} | \psi, t \rangle. \quad (3.81)$$

Dazu spezialisieren wir uns an dieser Stelle auf Hamilton-Operatoren vom Typ

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}), \quad (3.82)$$

welche ein quantenmechanisches Teilchen der Masse m in einem Potential $V(\vec{x})$ beschreiben.

Das Potential sei hermitesch wegen der geforderten Hermitizität von H . Da V nur von \vec{x} abhängt, ist V diagonal im Ortsraum

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}'' | V(\vec{x}) | \vec{x}' \rangle &= V(\vec{x}'') \langle \vec{x}'' | \vec{x}' \rangle \\ &= V(\vec{x}'') \delta^{(3)}(\vec{x}'' - \vec{x}') \end{aligned} \quad (3.83)$$

Projizieren wir (3.80) also auf den Ortsraum, so erhalten wir

$$i\hbar \langle \vec{x}' | \frac{\partial}{\partial t} | \psi, t \rangle = \langle \vec{x}' | H | \psi, t \rangle$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{x}' | \psi, t \rangle = \langle \vec{x}' | \frac{\vec{p}^2}{2m} | \psi, t \rangle + \langle \vec{x}' | V(\vec{x}') | \psi, t \rangle$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}', t) = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \right)^2 \psi(\vec{x}', t) + V(\vec{x}') \psi(\vec{x}', t)$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}', t) = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{x}', t) + V(\vec{x}') \psi(\vec{x}', t)$$

(3.84)

Dies ist die zeitabhängige Schrödingersche Wellengleichung für die Ortsraumwellenfunktion.

In vielen Darstellungen der Quantenmechanik bildet (3.84) den Startpunkt der Quantenmechanik als Wellenmechanik.

Wie in Abschnitt 3.3 diskutiert, ist die Zeitentwicklung eines Zustands besonders einfach, wenn er Eigenzustand des Hamilton-Operators ist:

$$H |\Psi_E\rangle = E |\Psi_E\rangle$$

$$\Rightarrow |\Psi_E, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} |\Psi_E\rangle \quad (3.85)$$

wobei $|\Psi_E\rangle \equiv |\Psi_E, t=0\rangle$ die Anfangsbedingung ist.

Für solche stationären Zustände vereinfacht sich also die Schrödinger-Gleichung (3.84); sei dazu

$$\Psi(\vec{x}', t) = \langle \vec{x}' | \Psi_E, t \rangle \equiv \Psi_E(\vec{x}') \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad | \Psi_E(\vec{x}') = \langle \vec{x}' | \Psi_E \rangle$$

$$\stackrel{(3.84)}{\Rightarrow} E \Psi_E(\vec{x}') = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 \Psi_E(\vec{x}') + V(\vec{x}') \Psi_E(\vec{x}') \quad (3.86)$$

Dies ist die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung.

Mit anderen Worten: $\Psi(\vec{x}', t) = \Psi_E(\vec{x}') e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ stellt

einen Separationsansatz für die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung dar.

In den folgenden Kapiteln werden wir die Schrödinger-Gleichung anhand einfacher Beispiele näher diskutieren.