

X. Formulierung der Quantenmechanik, Teil 2

10.1 Schrödingerbild

Die Dynamik quantenmechanischer Systeme haben wir wie durch eine unitäre Transformation der Zustände beschrieben

$$(588) \quad i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

formale Lösung $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$

$$(589) \quad |\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

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

$$(590) \quad i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_0) \hat{H}$$

mit $\hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$

$$(591) \quad \hat{U}(t, t_0) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t - t_0) \right\}$$

Gleichung (589) definiert das Schrödingerbild
Zeitentwicklung von Erwartungswerten

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$$

$$\begin{aligned} (592) \quad &= \langle \hat{U}(t, t_0) \psi(t_0) | \hat{A} | \hat{U}(t, t_0) \psi(t_0) \rangle \\ &= \langle \psi(t_0) | \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \end{aligned}$$

10.2 Heisenbergbild

(592) legt nahe einen zeitabhängige Observable zu definieren

$$\hat{A}_H(t) \equiv \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0)$$

Das führt uns auf das Heisenbergbild

$$(593) \quad \boxed{\hat{A}_H(t) \equiv \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0)}$$

Operator im Heisenbergbild

Erwartungswerte müssen im Heisenbergbild dann aber bzgl. des zeitunabhängigen Zustandes

$$(594) \quad \boxed{|\psi\rangle = |\psi(t_0)\rangle = \text{konst}}$$

ausgewertet werden

Aus (593) folgt die Bewegungsgleichung
von Operatoren im Heisenbergbild

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

D.h.

$$(595) \quad \boxed{\frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}_H]}$$

Bewegungsgleichung von Operatoren
im Heisenbergbild

Bewegungsgleichungen der fundamentalen
Operatoren

$$(596) \quad \frac{d}{dt} \hat{x} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] = \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}, \hat{H}]$$

$$(597) \quad \frac{d}{dt} \hat{p} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}] = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}, \hat{H}]$$

Diese Gleichungen haben eine formale
Analogie zur klassischen Mechanik

$$(598) \quad \frac{d}{dt} x = \{x, H\}_P \quad \frac{d}{dt} p = \{p, H\}_P$$

woher

$$(599) \quad \{ \cdot, \cdot \}_P \longrightarrow \frac{1}{i\hbar} [\cdot, \cdot]$$

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H, H] \Leftrightarrow \frac{d}{dt} A(t) = \{A(t), H\}_P$$

(600)

10.3 Wechselwirkungsbild

Für manche Anwendungen ist es sinnvoll die Zeitabhängigkeit zwischen Operatoren und Zuständen aufzuteilen, z.B. durch

$$(601) \quad \hat{H} = \underbrace{\hat{H}_0}_{\text{"frei" Hamiltonian}} + \underbrace{\hat{H}_1}_{\text{"Wechselwirkungshamiltonian"}}$$

"frei" Hamiltonian

"Wechselwirkungshamiltonian"

$\hat{H}_0$ ist oft so, daß EW und EZ einfach zu ermitteln sind.

Wir definieren

$$(602) \quad \hat{U}_0(t, t_0) \equiv e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t - t_0)}$$

$$(603) \quad i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}_0(t, t_0) = \hat{H}_0 \hat{U}_0(t, t_0) = \hat{U}_0 \hat{H}_0$$

Der totale Zeitentwicklungsoperator lautet
hingegen

$$(603) \quad \hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t - t_0)}$$

Nun führen wir den Zeitentwicklungsoperator
im Wechselwirkungsbild ein:

$$(604) \quad \hat{U}_I(t, t_0) \equiv \hat{U}_0^{-1}(t, t_0) \hat{U}(t, t_0)$$

Man beachte, daß i.A. $\hat{U}_I(t, t_0) \neq e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_I (t - t_0)}$
da $[\hat{H}_0, \hat{H}_I] \neq 0$ i.A.

Jetzt können wir die Zeitabhängigkeit
zwischen Zuständen und Operatoren aufteilen

$$(605) \quad |\psi_I(t)\rangle \equiv \hat{U}_I(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

$$(606) \quad \hat{A}_I(t) \equiv \hat{U}_0^{-1}(t, t_0) \hat{A} \hat{U}_0(t, t_0)$$

hier
 $\hat{H}_0$

Es gilt offensichtlich die Äquivalenz der Bilder für Erwartungswerte

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{A} \rangle_t &= \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle \\
 &= \langle \psi(t_0) | \hat{U}^{-1}(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \\
 &= \langle \psi(t_0) | \hat{A}_I(t) | \psi(t_0) \rangle \\
 &= \langle \psi(t_0) | \hat{U}_I^{-1} \hat{U}_0^{-1} \hat{A} \hat{U}_0 \hat{U}_I | \psi(t_0) \rangle \\
 &= \langle \psi_I(t) | \hat{A}_I(t) | \psi_I(t) \rangle
 \end{aligned}$$

Dynamik von Operatoren im Wechselwirkungsbild

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \hat{A}_I(t) &= \left(\frac{d}{dt} \hat{U}_0^{-1} \right) \hat{A} \hat{U}_0 + \hat{U}_0^{-1} \hat{A} \left(\frac{d}{dt} \hat{U}_0 \right) \\
 &= \frac{i}{\hbar} \left(\hat{H}_0 \hat{U}_0^{-1} \hat{A} \hat{U}_0 - \hat{U}_0^{-1} \hat{A} \hat{U}_0 \hat{H}_0 \right) \\
 &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{A}_I(t)]
 \end{aligned}$$

(607) $\Rightarrow$

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_I(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{A}_I(t)]$$

Die Zustandsdynamik ist etwas komplizierter:

$$\frac{d}{dt} |\varphi_I(t)\rangle = \underbrace{\left(\frac{d}{dt} \hat{U}_I(t, t_0) \right)}_2 |\varphi(t_0)\rangle$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{U}_I(t, t_0) &= \frac{d}{dt} \left(e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t-t_0)} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t-t_0)} \right) \\ &= \frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 \hat{U}_I - \frac{i}{\hbar} \hat{U}_I \hat{H} \\ &= \frac{i}{\hbar} \left(\hat{H}_0 - \hat{U}_I \hat{H} \hat{U}_I^{-1} \right) \hat{U}_I \end{aligned}$$

Nun ist

$$\begin{aligned} \hat{U}_I \hat{H} \hat{U}_I^{-1} &= \\ &= e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t-t_0)} \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t-t_0)} \hat{H} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t-t_0)}}_{= \hat{H}} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t-t_0)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \hat{U}_0^{-1} \hat{H} \hat{U}_0 = \underbrace{\hat{U}_0^{-1} \hat{H}_0 \hat{U}_0}_{= \hat{H}_0} + \hat{U}_0^{-1} \hat{H}_1 \hat{U}_0 \\ &= \hat{H}_0 + \hat{U}_0^{-1} \hat{H}_1 \hat{U}_0 \end{aligned}$$

und damit

$$H_0 - U_I H U_I^{-1} = \cancel{H_0} - \cancel{H_0} - U_0^{-1} H_I U_0 \\ = -H_{II}(t)$$

$$(608) \quad H_{II}(t) \equiv U_0^{-1} H_I U_0 \quad U_0 = U_0(t, t_0)$$

Wechselwirkungsoperator im Wechselwirkungsbild

Damit finden wir die Bewegungsgleichung

$$(609) \quad \frac{d}{dt} U_I(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} H_{II}(t) U_I(t, t_0)$$

Man beachte, daß H_{II} explizit zeitabhängig ist und i.-A.

$$(610) \quad [H_{II}(t_1), H_{II}(t_2)] \neq 0 \quad |$$

Das hat zur Folge, daß die Lösung von (609) i.-A. nicht

$$(611) \quad U_I(t, t_0) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau H_{II}(\tau) \right\} \quad \text{ist}$$

Die Lösung von (609) erfordert etwas Sorgfalt. Für kleine Zeitinkremente gilt aber

$$U_I(t+\delta t, t) = 1 - \frac{i}{\hbar} H_{\text{I}}(t) \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

Damit

$$\begin{aligned} U_I(t+2\delta t, t) &= U_I(t+2\delta t, t+\delta t) U_I(t+\delta t, t) \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} \left(H_{\text{I}}(t+\delta t) + H_{\text{I}}(t) \right) \delta t \\ &\quad + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 H_{\text{I}}(\underline{t+\delta t}) H_{\text{I}}(\underline{t}) \delta t^2 \end{aligned}$$

Diese Prozedur kann man fortsetzen und findet

$$\begin{aligned} U_I(t+N\delta t, t) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} H_{\text{I}}(t+j\delta t) \delta t \\ &\quad + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \sum_{j_1=1}^{N-1} \sum_{j_2=0}^{j_1} H_{\text{I}}(t+j_1\delta t) H_{\text{I}}(t+j_2\delta t) \delta t^2 \\ &\quad + \dots \end{aligned}$$

$$\text{note } j_1 \delta t \geq j_2 \delta t$$

Im Limit $N \rightarrow \infty$, $\delta t \rightarrow 0$ ergibt sich die sogenannte Dysonsche Reihe

$$\begin{aligned}
 U_I(t, t_0) = & \mathbb{1} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t d\tau H_I(\tau) \\
 & + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^{\tau} d\tau' H_I(\tau) H_I(\tau') \\
 & + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3 \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^{\tau} d\tau' \int_{t_0}^{\tau'} d\tau'' H_I(\tau) H_I(\tau') H_I(\tau'') \\
 & + \dots
 \end{aligned}
 \tag{6.12}$$

Man beachte die Obergrenzen der Integrale und das Fehlen von Vorfaktoren $\frac{1}{2!}$, $\frac{1}{3!}$ etc.

In allen Integranden gilt:

$$\tau \geq \tau' \geq \tau'' \geq \dots$$

D.h. die Hamiltonoperatoren $H_I(\tau)$ in der Dyson'schen Reihe sind so angeordnet, daß Operatoren zu größeren Zeiten stets links von Operatoren zu kleineren Zeiten zu stehen kommen. Man spricht von einem zeit-geordneten Produkt

Def: Dyson'scher Zeitordnungsoperator T

$$(613) \quad T \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \equiv \begin{cases} \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) & t_1 \geq t_2 \\ \hat{B}(t_2) \hat{A}(t_1) & t_1 < t_2 \end{cases}$$

Anti Zeitordnungsoperator $\overline{T}$

$$(614) \quad \overline{T} \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \equiv \begin{cases} \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) & t_1 \leq t_2 \\ \hat{B}(t_2) \hat{A}(t_1) & t_1 > t_2 \end{cases}$$

Damit kann die Dyson'sche Reihe kompakt geschrieben werden

(615)

$$\hat{U}_I(t, t_0) = T \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}_I(\tau) \right\}$$

$$\hat{U}_I(t, t_0) = \overline{T} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}_I(\tau) \right\}$$

10.4 Gemischte Zustände:

Der Dichteoperator

Wir hatten den Zustand eines quantenmechanischen Systems durch einen Vektor im Hilbertraum beschrieben, der jedoch nur bis auf einen Phasenfaktor eif festgelegt war.

⇒ Redundanz?

Was sind meßbare Größen?

- Erwartungswerte
- Wahrscheinlichkeiten
z.B. Messung liefert
Ergebnis in Intervall I
 $\hat{P}_I$ Projektor

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

$$\begin{aligned} \|\hat{P}_I |\psi\rangle\|^2 &= \\ &= \langle \psi | \hat{P}_I | \psi \rangle \end{aligned}$$

- Koinkidenzwahrscheinlichkeiten
 $\hat{A} : I_A \quad \hat{B} : I_B$

$$\begin{aligned} \|\hat{P}_{I_A} \hat{P}_{I_B} |\psi\rangle\|^2 &= \\ &= \langle \psi | \hat{P}_{I_A} \hat{P}_{I_B} | \psi \rangle \end{aligned}$$

Allz diese Größen lassen sich durch den Projektionsoperator

$$(616) \quad \hat{P}_{|\psi\rangle} = |\psi\rangle \langle \psi|$$

ausdrücken. Wir finden nämlich

$$(617) \quad \langle \hat{A} \rangle = \text{Sp} \{ |\psi\rangle \langle \psi| \hat{A} \}$$

(618) wobei

$$\text{Sp} \{ \hat{O} \} = \sum_n \langle \phi_n | \hat{O} | \phi_n \rangle \quad \{ |\phi_n\rangle \}_{\text{ONB}}$$

denn

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \sum_n \langle \phi_n | \psi \rangle \langle \psi | \hat{A} | \phi_n \rangle \\ &= \sum_n \langle \psi | \hat{A} | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \end{aligned}$$

$= 1$ etc.

$\hat{P}_{|\psi\rangle}$ ist unabhängig von der Phase von $|\psi\rangle$

Ein q.m. Zustand kann durch einen orthogon. Projektor beschrieben werden

$$\hat{\mathcal{S}} = \hat{P}_{|\psi\rangle}$$

Dichteoperator
eines reinen Zustandes

Eigenschaften

$$\begin{aligned} (i) \quad \text{Sp} \{ \hat{\mathcal{S}} \} &= \sum_n \langle \phi_n | \psi \rangle \langle \psi | \phi_n \rangle = \sum_n |\langle \phi_n | \psi \rangle|^2 \\ &= \sum_n \langle \psi | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1 \end{aligned}$$

Erhaltung der Wahrscheinlichkeit (619)

$$\text{Sp} \{ \hat{\mathcal{S}} \} = 1$$

(ii)
(620)

$$\hat{\mathcal{S}}^\dagger = \hat{\mathcal{S}}$$

Mit Hilfe des Dichteoperators lässt sich die Darstellung des physikalischen Zustandes eines Quantensystems auch auf Situationen mit unvollständiger Information verallgemeinern.

Wenn wir nur wissen daß ein q.m. System mit Wahrscheinlichkeit p_j im Zustand $|\varphi_j\rangle$ ist, gilt nicht

$$|\varphi\rangle = \sum_j \sqrt{p_j} |\varphi_j\rangle \quad \Downarrow$$

da z.B. für $j=1,2$

$$\langle \hat{A} \rangle = p_1 \langle \varphi_1 | \hat{A} | \varphi_1 \rangle + p_2 \langle \varphi_2 | \hat{A} | \varphi_2 \rangle$$

korrekt ✓

$$+ \sqrt{p_1 p_2} (\langle \varphi_1 | \hat{A} | \varphi_2 \rangle + \langle \varphi_2 | \hat{A} | \varphi_1 \rangle)$$

~~keine!~~

Aber
(621)

$$\hat{\rho} = \sum_j p_j |\varphi_j\rangle \langle \varphi_j|$$

$$\sum_j p_j = 1$$

$\{|\varphi_j\rangle\}$ ONB

Dichteoperator eines gemischten Zustandes

Hier gilt wie erwartet

$$(622) \quad \langle \hat{A} \rangle = \sum_j p_j \langle \varphi_j | \hat{A} | \varphi_j \rangle$$

Aus (621) findet man umgekehrt für die Wahrscheinlichkeiten (falls $|\varphi_j\rangle$ orthogonal)

$$(623) \quad p_j = \langle \varphi_j | \hat{G} | \varphi_j \rangle$$

Es gilt immer noch

$$\text{Sp}\{\hat{G}\} = 1 \quad \hat{G}^\dagger = \hat{G}$$

aber i.A.

$$\hat{G}^2 = \sum_j p_j^2 |\varphi_j\rangle \langle \varphi_j|$$

$$(624) \quad \text{Sp}\{\hat{G}^2\} = \sum_j p_j^2 \geq 1$$

außer für einen reinen Zustand $p_{j_0} = 1$; $p_{j'} = 0$

Mit der Verallgemeinerung des g.m. Zustandes können wir nun auch die Messung einer Observablen mit entarteten Eigenwerten beschreiben:

Wird bei einer Messung einer Observable der m-fach entartete Eigenwert a gemessen, so geht der Dichteoperator des Systems in die gewichtete Summe der eindimensionalen Projektoren auf die entarteten Eigenzustände $|a_j\rangle$ über

$$(625) \quad \hat{G}_0 \longrightarrow \hat{G} = \sum_{j=1}^m p_j |a_j\rangle \langle a_j|$$

wobei

$$P_j = \frac{\langle a_j | \hat{S}_0 | a_j \rangle}{\sum_{j=n}^m \langle a_j | \hat{S}_0 | a_j \rangle}$$

Bewegungsgleichung für $\hat{S}$ (Schrödingervbild)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{S} &= \sum_j P_j \frac{d}{dt} (| \varphi_j(t) \rangle \langle \varphi_j(t) |) \\ &= \sum_j P_j \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \left(\hat{H} | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j | - | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j | \hat{H} \right) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_j \left[\hat{H}, | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j | \right] \end{aligned}$$

$$(626) \quad \boxed{\frac{d}{dt} \hat{S} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{S}]}$$

Bem: ähnliche Gleichung wie für Operatoren im Heisenbergbild, aber unterschiedliches Vorzeichen!