1.2 Grundlagen der Quantisierung

Wir fangen wieder mit klassischen Teilchen an. Der wohl einfachste Weg zur Quantisierung basiert auf dem Hamilton-Formalismus.

$$H = H(x,p) \quad ; \quad \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} \, , \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}$$

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial x}\dot{x} + \frac{\partial H}{\partial p}\dot{p} = \frac{\partial H}{\partial x}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial x} = 0 \, . \qquad \text{(Energie-Erhaltung)}$$

Poisson-Klammer:

$$\{F,G\}_p \equiv \frac{\partial F}{\partial x}\frac{\partial G}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p}\frac{\partial G}{\partial x} \, .$$

Falls ohne Argument, seien x und p die Werte am gleichen Zeitpunkt, z.B. $t=0$!

Dann gilt:

$$\{x,x\}_p = 0$$
$$\{p,p\}_p = 0$$
$$\{x,p\}_p = 1$$
$$\dot{x}(t) = \{x,H\}_p$$
$$\dot{p}(t) = \{p,H\}_p$$

Notabene:

* Die ersten drei enthalten keine dynamische Information. Sie bestimmen nur, dass die Koordinaten unseres Phasenraums "kanonisch" normiert sind.
* Die letzten zwei bestimmen die Dynamik bzw. die Zeitentwicklung. Erst hier müssen wir die Hamiltonfunktion H bzw. das Potential $V(x)$ kennen!

Quantisierung

[Wir benutzen im Folgenden Einheiten wobei $\hbar = h/2\pi = 1$.]

$$\left.\begin{array}{l} x \to \hat{x} \\ p \to \hat{p} \end{array}\right\} \text{Operatoren}$$

$$\left.\begin{array}{l} [\hat{x},\hat{x}] = 0 \\ [\hat{p},\hat{p}] = 0 \\ [\hat{x},\hat{p}] = i \end{array}\right\} \text{Gleichzeitige Vertauschungsrelationen: "Normierung".}$$

$$\left.\begin{array}{l} i\frac{d}{dt}\hat{x}(t) = [\hat{x},\hat{H}] \\ i\frac{d}{dt}\hat{p}(t) = [\hat{p},\hat{H}] \end{array}\right\} \text{Dynamik im Heisenberg-Bild.}$$

Zur Erinnerung:

Die gleichzeitigen Vertauschungsrelationen sind immer dieselben, aber für die Zeitabhängigkeit gibt es verschiedene „Bilder".

Im Schrödinger-Bild sind Operatoren zeitunabhängig; alle Zeitabhängigkeit ist in den Zuständen. Die Zustände erfüllen die Schrödinger-Gleichung:

$$i \frac{d}{dt} |t;s\rangle = \hat{H} |t;s\rangle$$

$$\Rightarrow \quad |t;s\rangle = e^{-i\hat{H}t} |0;s\rangle \, .$$

Erwartungswert eines Operators $\hat{O}_s$:

$$\langle t;s| \hat{O}_s |t;s\rangle = \langle 0;s| e^{i\hat{H}t} \hat{O}_s e^{-i\hat{H}t} |0;s\rangle \, .$$

Im Heisenberg-Bild sind Operatoren zeitabhängig, Zustände zeitunabhängig. Erwartungswerte bleiben invariant:

$$|H\rangle \equiv |0;s\rangle$$

$$\hat{O}_H(t) \equiv e^{i\hat{H}t} \hat{O}_s e^{-i\hat{H}t}$$

$$\langle H| \hat{O}_H(t) |H\rangle = \langle t;s| \hat{O}_s |t;s\rangle \, .$$

Die Heisenbergsche Bewegungsgleichung beschäftigt sich also mit Operatoren:

$$i \frac{d}{dt} \hat{O}_H(t) = [\hat{O}_H(t), \hat{H}] \, .$$

— o —

Um die Signifikanz der Quantisierung zu verstehen, betrachten wir das klassische Beispiel, den harmonischen Oszillator.

$$\hat{H} \equiv \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 \quad ; \quad m, \omega: \text{ freie Parameter}$$

$$\omega \to 0 \Leftrightarrow \text{freies Teilchen}$$

Standardnotation: [Aufgabe 3.1]

$$\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\omega}} \hat{p}$$

$$\hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\omega}} \hat{p}$$

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+)$$

$$\hat{p} = i \sqrt{\frac{m\omega}{2}} (-\hat{a} + \hat{a}^+)$$

Der klassische Fall

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \quad \Rightarrow \quad p = m\dot{x}$$

$$\dot{p} = m\ddot{x} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -m\omega^2 x$$

$$\ddot{x} = -\omega^2 x \qquad x(t) = A \cdot \cos\omega t + B \sin\omega t$$

$$= x(0) \cdot \cos\omega t + \frac{p(0)}{m\omega} \cdot \sin\omega t \quad .$$

Die klassische Lösung enthält also zwei freie Parameter, $x \equiv x(0)$ und $p \equiv p(0)$. Damit ist

$$\langle [x(t)]^2 \rangle \equiv \frac{1}{T} \int_0^T dt \, [x(t)]^2 \Big|_{T=\frac{2\pi}{\omega}}$$

$$= \frac{1}{2} [x(0)]^2 + \frac{1}{2} \left[\frac{p(0)}{m\omega}\right]^2 \in [0, \infty) \quad .$$

Notabene: $\{x, x\}_p = 0$ aber

$$\{x(t), x\}_p = \{x \cos\omega t, x\}_p + \frac{1}{m\omega} \{p \sin\omega t, x\}_p$$

$$= -\frac{1}{m\omega} \sin\omega t \quad \neq 0 \quad !$$

Quantenmechanisch [Heisenberg-Bild]

$$[A, BC] = B[A,C] + [A,B]C$$

$$i \frac{d}{dt} \hat{x}_H = [\hat{x}_H, \hat{H}] = \frac{1}{2m} [\hat{x}_H, \hat{p}_H^2] = \frac{1}{2m} \left\{ \hat{p}_H [\hat{x}_H, \hat{p}_H] + [\hat{x}_H, \hat{p}_H] \hat{p}_H \right\}$$

$$\Leftrightarrow \quad \frac{d}{dt} \hat{x}_H = \frac{\hat{p}_H}{m}$$

$$i \frac{d}{dt} \hat{p}_H = [\hat{p}_H, \hat{H}] = \frac{m\omega^2}{2} [\hat{p}_H, \hat{x}_H^2] = \frac{m\omega^2}{2} \left\{ \hat{x}_H [\hat{p}_H, \hat{x}_H] + [\hat{p}_H, \hat{x}_H] \hat{x}_H \right\}$$

$$\Leftrightarrow \quad \frac{d}{dt} \hat{p}_H = -m\omega^2 \hat{x}_H$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d^2}{dt^2} \hat{x}_H = -\omega^2 \hat{x}_H \quad \longrightarrow$$ dieselbe Gleichung wie im klassischen Fall!

Lösung: $\hat{x}_H(t) = \hat{x} \cos\omega t + \frac{\hat{p}}{m\omega} \sin\omega t$,

wo $\hat{x} \equiv \hat{x}_H(0) \equiv \hat{x}_S$, $\hat{p} \equiv \hat{p}_H(0) \equiv \hat{p}_S$.

Und: $\frac{1}{m\omega} \hat{p}_H(t) = -\hat{x} \sin\omega t + \frac{\hat{p}}{m\omega} \cos\omega t$.

Mit Hilfe von $\hat{a}, \hat{a}^{+}$:

$$\hat{x}_H(t) = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}}\left\{(\hat{a}+\hat{a}^{+})\cos\omega t + i(-\hat{a}+\hat{a}^{+})\sin\omega t\right\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2m\omega}}\left\{\hat{a}\,e^{-i\omega t} + \hat{a}^{+}e^{i\omega t}\right\},$$

$$\hat{x}_H(0) = \hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}}\left\{\hat{a}+\hat{a}^{+}\right\}.$$

Dann zum Beispiel:

$$[\hat{x}_H(t), \hat{x}_H(0)] = \frac{1}{2m\omega}\left\{[\hat{a},\hat{a}^{+}]e^{-i\omega t} + [\hat{a}^{+},\hat{a}]e^{i\omega t}\right\}$$

$$= \frac{1}{2m\omega}\left\{e^{-i\omega t} - e^{i\omega t}\right\} = \frac{1}{im\omega}\sin\omega t$$

$\Rightarrow$ die Vertauschung ist nichttrivial für $t \neq 0$!

Letztendlich:

$$\langle n|[\hat{x}_H(t)]^2|n\rangle = \frac{1}{2m\omega}\langle n|\left\{\hat{a}\hat{a}\,e^{-2i\omega t} + \hat{a}\hat{a}^{+} + \hat{a}^{+}\hat{a} + \hat{a}^{+}\hat{a}^{+}e^{2i\omega t}\right\}|n\rangle$$

$$\stackrel{\text{Aufgabe 3.1}}{=} \frac{1}{2m\omega}\langle n|\left\{\ldots + \hat{a}\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle + \hat{a}^{+}\sqrt{n}\,|n-1\rangle\right\}$$

$$= \frac{1}{2m\omega}(2n+1) > 0.$$

$\therefore$ Die quantisierte Lösung ähnelt der klassischen Lösung sehr — die Zeitabhängigkeit sieht identisch aus — aber hat im gewissen Sinne weniger Freiheit: die Vertauschungsrelationen bestimmen den Wert von $\langle n|[\hat{x}_H(t)]^2|n\rangle$, während $\langle x^2(t)\rangle$ im klassischen Fall einen beliebigen Wert hat. D.h., Quantenmechanik bestimmt die „Normierung" von Fluktuationen, falls der Zustand bekannt ist.

— · —