

3.3. Zeitentwicklung, Bilder

[Fließbach 15, 38, 35; Griffiths · Anhang A]

Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung :

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle. \quad (\text{vielleicht besser : } |\Psi\rangle \rightarrow |E\rangle \text{ oder } |\Psi_E\rangle)$$

Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung [im „Schrödinger-Bild“]:

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle}$$

„Hamilton-Operator erzeugt Zeitentwicklung“

Wir bezeichnen die Lösung mit $|\Psi(t)\rangle$ und schreiben

$$|\Psi(t)\rangle =: \hat{U}(t; t_0) |\Psi(t_0)\rangle,$$

wobei $\hat{U}(t; t_0)$ der Zeitentwicklungsoperator heisst.

Der Zeitentwicklungsoperator erfüllt die Gleichungen

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t; t_0) = \hat{H} \hat{U}(t; t_0), \\ \hat{U}(t_0; t_0) = \hat{1}. \end{cases}$$

Der Zeitentwicklungsoperator besitzt wichtige Eigenschaften:

(i) $\hat{U}(t; t_0)$ ist unitär, d.h. $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{1} \quad \forall t$

Schrödinger-Gl. für einen konjugierten Vektor :

$$\langle i\hbar \frac{d}{dt} \Psi | = -i\hbar \langle \frac{d\Psi}{dt} | = \langle \hat{H} \Psi | = \langle \Psi | \hat{H}^\dagger$$

$$\hat{H}^\dagger = \hat{H}$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = -\langle \Psi_1 | \hat{H}^\dagger | \Psi_2 \rangle + \langle \Psi_2 | \hat{H} | \Psi_1 \rangle = 0$$

$$\Rightarrow \langle \Psi_1(t) | \Psi_2(t) \rangle = \langle \Psi_1(t_0) | \hat{U}^\dagger(t; t_0) \hat{U}(t; t_0) | \Psi_2(t_0) \rangle \text{ ist zeitunabhängig}$$

$$\Rightarrow \hat{U}^\dagger(t; t_0) \hat{U}(t; t_0) = \hat{1}$$

(ii) $\hat{U}(t; t_0)$ kann formal als $\hat{U}(t; t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)\right)$ ausgedrückt werden

$$* \quad i\hbar \frac{d}{dt} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n (t-t_0)^n \hat{H}^n = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{n-1} (t-t_0)^{n-1} \hat{H}^n$$

$$\stackrel{n=1+m}{=} \hat{H} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^m (t-t_0)^m \hat{H}^m = \hat{H} \hat{U}(t; t_0) \quad \square$$

$$* \quad \hat{U}(t_0; t_0) = \exp(\hat{0}) = \hat{1} \quad \square$$

Interessante Folgen:

(a) Zeitentwicklung in Energiebasis

Wir schreiben den Anfangszustand als

$$|\Psi(t_0)\rangle = \sum_E |E\rangle \langle E|\Psi\rangle = \sum_E c_E |E\rangle, \quad c_E := \langle E|\Psi(t_0)\rangle.$$

Dann ist

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \sum_E c_E e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} |E\rangle \\ &= \sum_E c_E e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t_0)} |E\rangle \end{aligned} \quad (\text{vgl. Seite 13})$$

Wahrscheinlichkeit für den Energie-Eigenwert E' :

$$P_\Psi(E') = |\langle E'|\Psi(t)\rangle|^2 = |c_{E'} e^{-\frac{i}{\hbar} E'(t-t_0)}|^2 = |c_{E'}|^2.$$

Diese bleibt unverändert, obwohl $|\Psi(t)\rangle \neq |\Psi(t_0)\rangle$.

(b) Zeitentwicklung der Erwartungswerte

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle &= -\langle \Psi(t) | \hat{H} \hat{A} | \Psi(t) \rangle \\ &\quad + \langle \Psi(t) | \hat{A} \hat{H} | \Psi(t) \rangle \\ &= \langle \Psi(t) | [\hat{A}, \hat{H}] | \Psi(t) \rangle \end{aligned}$$

„das Ehrenfestsche Theorem“.

D.h., Erwartungswert ist zeitunabhängig genau dann, wenn der Operator mit dem Hamilton-Operator vertauscht.

Eine solche Observable nennen wir Erhaltungsgröße.

Betrachten wir letztendlich Zeitabhängigkeit aus einem anderen Winkel, nämlich durch die Einführung des „Heisenberg-Bildes“:

Schrödinger-Bild: $i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle$ „Zustände sind zeitabhängig“.

$\frac{d}{dt} \hat{A} = 0$ „Operatoren aber nicht“.

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

Heisenberg-Bild:

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \langle \Psi(0) | \hat{U}^\dagger(t;0) \hat{A} \hat{U}(t;0) | \Psi(0) \rangle$$

Wir definieren: $|\Psi_H\rangle := |\Psi(0)\rangle$
 $= \hat{U}^\dagger(t;0) |\Psi(t)\rangle$

„Zustände sind zeitunabhängig“

$$\hat{A}_H(t) := \hat{U}^\dagger(t;0) \hat{A} \hat{U}(t;0)$$
$$= e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$$

„Operatoren sind zeitabhängig“

Physikalische Erwartungswerte bleiben unverändert; die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung wird aber ersetzt durch

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = -\hat{H} \hat{A}_H(t) + \hat{A}_H(t) \hat{H} = \underline{\underline{[\hat{A}_H(t), \hat{H}]}}$$

(vgl. Seite 46)

Zusammenfassung: Postulate der Quantenmechanik (IV) (vgl. Seite 40)

IV. Die zeitliche Entwicklung von Zuständen im Schrödinger-Bild wird durch die Schrödinger-Gleichung bestimmt:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle,$$

wobei \hat{H} der Hamilton-Operator ist.

Appendix : Einsicht in die Quantisierung

Auch die klassischen Bewegungsgleichungen können in verschiedenen "Bildern" dargestellt werden.

Newton : $\dot{p} = m\ddot{x} = -\frac{\delta V}{\delta x}$

Hamilton : $H(p,x) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$; x, p formal unabhängig
(Mechanik II)

Poisson-Klammer:

$$\{F, G\} := \frac{\delta F}{\delta x} \frac{\delta G}{\delta p} - \frac{\delta F}{\delta p} \frac{\delta G}{\delta x}$$

Dann gilt:

$\{x, x\} = 0$	} "kanonische Normierung" *
$\{p, p\} = 0$	
$\{x, p\} = 1$	
$\dot{x} = \{x, H\} = \frac{p}{m}$	} "Dynamik"
$\dot{p} = \{p, H\} = -\frac{\delta V}{\delta x}$	

Quantisierung : $x \rightarrow \hat{x}, p \rightarrow \hat{p}, \{ \cdot, \cdot \} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [\cdot, \cdot]$

$[\hat{x}, \hat{x}] = 0$	} gleichzeitige Vertauschungsrelationen: "kanonische Quantisierung"
$[\hat{p}, \hat{p}] = 0$	
$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$	

$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{x}(t) = [\hat{x}, \hat{H}]$	} "Dynamik" im Heisenberg-Bild
$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{p}(t) = [\hat{p}, \hat{H}]$	

* Kanonische Transformation: $X = X(x,p), P = P(x,p)$ so dass $\{F, G\}_{XP} = \{F, G\}_{xp}$ gilt. Schematisch:

