1) Darstellungstheorie der Quantenmechanik
oder von Schrödinger zu Dirac und Heisenberg

📖Burgd. 6
📖Schwabl 8

Ziel

Darstellung Schrödinger-Glg. in verschiedenen Basis-Syst.
Transfer der Zeitentwicklung von Wellenfunktion zum Operator

1.1) Dirac Notation *oder von bra's ⟨ and ket's ⟩*

📖Burgd. 6.1
📖Schwabl. 8.2

Ziel

Basisunabhängige Notation der Schrödinger-Glg.

Ausgangspunkt: Schrödinger-Glg.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = H(\vec{r})\psi(\vec{r},t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r},t) \qquad (1)$$

Frage

Warum tritt – im Gegensatz zur analytischen Mechanik – in der Schrödinger-Gleichung nur $\vec{r}$ nicht $\vec{p}$ auf?

$$H(\vec{r},\vec{p}) \rightarrow H(\vec{r}) \quad , \quad \vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$$

Antwort

Wellenfunktion $\psi(t) \in \mathcal{H}$ ist Vektor
in linearem Vektorraum (Hilbertraum $\mathcal{H}$)
$\psi(\vec{r}, t)$, $H(\vec{r})$ sind lediglich Darstellungen in Ortsraum-Basis

Vgl. mit $\vec{v} \in \mathbb{R}^3$
Basis 1: $\vec{v} = \sum_i v_i \vec{e}_i$; Basis 2: $\vec{v} = \sum_i v_i' \vec{e}_i'$

$\psi(\vec{r}, t)$ entspricht v_i für fixen Zeitpunkt t
Dirac Notation $|\psi(t)\rangle$ entspricht $\vec{v}$

Skalarprodukt liefert $v_i = \vec{e}_i^{\,\mathrm{Tr}} \vec{v} = (\vec{e}_i, \vec{v}) = \sum_j \underbrace{(\vec{e}_i, \vec{e}_j)}_{\delta_{i,j}} (\vec{e}_j, \vec{v})$

Skalarprodukt liefert
$$\psi(\vec{r}, t) = \underbrace{\langle \vec{r} || \psi(t) \rangle}_{\equiv \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle} = \int \mathrm{d}^3 r' \; \underbrace{\langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle}_{\delta(\vec{r} - \vec{r}')} \; \underbrace{\langle \vec{r}' | \psi(t) \rangle}_{\psi(\vec{r}', t)} = \psi(\vec{r}, t)$$

Beispiel

Eigenwert-Glg. für Eigenfunktion $|\psi_{\vec{k}}\rangle \equiv |\vec{k}\rangle$
zum Impuls-Operator $\vec{p}$

Dirac-Notation:

$$\vec{p}\,|\psi_{\vec{k}}\rangle = \hbar\vec{k}\,|\psi_{\vec{k}}\rangle \tag{2}$$

$\Rightarrow$ Darstellung im Ortsraum durch Projektion auf $\langle\vec{r}|$ s.

$$\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\,\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \hbar\vec{k}\,\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \tag{3}$$

Ziel (erreicht)

Abstrakte, basisunabhängige Darstellung der Schrödinger-Glg.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \tag{4}$$

$\Rightarrow$ gewohnte Schödinger-Glg. im Orts-Raum

durch Projektion auf $\langle\vec{r}|$ s. 

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = H(\vec{r})\psi(\vec{r},t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r},t) \tag{1}$$

1.2) Impulsdarstellung der Schrödinger-Gleichung — Burgd. 6.2

oder Fouriertrafo von Differential- zu Integral-Glg. — Schwabl. 8.3.2

Ziel

Schödinger-Glg. im Impuls-Raum

folgt durch Projektion von $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$ auf $\langle\vec{p}|$ s. 

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{k},t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi(\vec{k},t) + \int \mathrm{d}^3k \underbrace{\tilde{V}(\vec{k'}-\vec{k})}_{\equiv\int \mathrm{d}^3r\,\frac{e^{i\vec{r}(\vec{k'}-\vec{k})}}{(2\pi)^3}V(\vec{r})\ \ \text{(F.T.)}} \psi(\vec{k},t) \quad (5)$$

Integralgleichung! (Fredholmsche, d.h. linear in $\psi(\vec{k},t)$
und konstante Integrationsgrenzen $[-\infty..\infty]$)

Schrödinger-Glg. im Impuls-Raum

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{k},t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi(\vec{k},t) + \int \mathrm{d}^3k'\,\tilde{V}(\vec{k'}-\vec{k})\psi(\vec{k'},t)$$

kann auch auf folgende Form gebracht werden (s. )

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{k},t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi(\vec{k},t) + V\Big(-\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{\vec{k}}\Big)\psi(\vec{k},t) \qquad (6)$$

Man sieht, Impuls-Darst. ist i.d.R. komplizierter,
da $V(\vec{r})$ i.d.R. verschiedene Potenzen von $\vec{r}$ enthält

Anwendung: periodisches $V(\vec{r}) = V(\vec{r}+\vec{R})$ in Festkörperphysik

Beispiel

Hamonischer Osszillator in einer Dimension (1D)
(zeitunabh. Schrödinger-Glg. im Impulsraum)

Klassische Mechanik: $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$

$$E\,\psi(\vec{k}) = \left[\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right] \psi(\vec{k}) \tag{7}$$

$$\overset{Imp.Darst.}{=} \left[\frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar^2 m\omega^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial p}\right)^2\right] \psi(\vec{k}) \tag{8}$$

folgt aus Analogie $x \leftrightarrow p$ oder Glg. (6).

Zusammenfassung

$$\langle \vec{r} | k \rangle = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} e^{i k \vec{r}}$$

	Orts-Darst.	Impuls-Darst.
Orthogon.	$\langle \vec{r} \| \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$	$\langle \vec{k} \| \vec{k}' \rangle = \delta(\vec{k} - \vec{k}')$
Vollständ.	$\int \mathrm{d}^3 r \, \| \vec{r} \rangle \langle \vec{r} \| = \mathbf{1}$	$\int \mathrm{d}^3 k \, \| \vec{k} \rangle \langle \vec{k} \| = \mathbf{1}$
Orts-Op. $\hat{\vec{r}}$	$\langle \vec{r} \| \hat{\vec{r}} \| \vec{r}' \rangle = \vec{r} \delta(\vec{r} - \vec{r}')$	$\langle \vec{k} \| \hat{\vec{r}} \| \vec{k}' \rangle = i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{k}} \delta(\vec{k} - \vec{k}')$
Impuls-Op. $\hat{\vec{p}}$	$\langle \vec{r} \| \hat{\vec{p}} \| \vec{r}' \rangle = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \delta(\vec{r} - \vec{r}')$	$\langle \vec{k} \| \hat{\vec{p}} \| \vec{k}' \rangle = \hbar \vec{k} \delta(\vec{k} - \vec{k}')$
S-Glg.	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{r} \| \psi(t) \rangle = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V \right] \langle \vec{r} \| \psi(t) \rangle$	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{k} \| \psi(t) \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \langle \vec{k} \| \psi(t) \rangle + \int \mathrm{d}^3 k' \, \tilde{V}(\vec{k}' - \vec{k}) \langle \vec{k}' \| \psi(t) \rangle$
Wellenfkt.	$\psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} \| \psi(t) \rangle$	$\psi(\vec{k}, t) = \langle \vec{k} \| \psi(t) \rangle$

1.3) Heisenbergsche Matrizenmechanik *oder Schödinger-Glg. in diskretem VONS*

Burgd. 6.3, 6.4
Schwabl. 8.3.3

Zusammenfassung (Heisenbergsche Matrizenmechanik)

Sei $\{|\phi_n\rangle\}_{n\in\mathbb{N}}$ *VONS*
z.B. Eigenbasis zu Operator A: $\quad A|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle$

Projektion von S-Glg. in Dirac-Notation auf $\langle\phi_n|$ *liefert* s. 

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{\psi_n(t)}_{\equiv\langle\phi_n|\psi(t)\rangle\equiv\psi(n,t)} = \sum_m \underbrace{H_{nm}}_{\equiv\langle\phi_n|H|\phi_m\rangle}\psi_m(t) \qquad (9)$$

Zusammenfassung (Transformationstheorie)

Betrachte zweites VONS $\{|\tilde{\phi}_n\rangle\}_{n\in\mathbb{N}}$
dann gilt analoge Matrizen-Glg.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{\tilde{\psi}_n(t)}_{\equiv\langle\tilde{\phi}_n|\psi(t)\rangle\equiv\tilde{\psi}(n,t)} = \sum_m \underbrace{\tilde{H}_{nm}}_{\equiv\langle\tilde{\phi}_n|H|\tilde{\phi}_m\rangle} \tilde{\psi}_m(t) \tag{10}$$

mit unitärer Basis-Transformation U $\quad (U^\dagger U = \mathbf{1})$ $\quad$ *s.* 

$$\tilde{H}_{nm} = \sum_{n'm'} \underbrace{\langle\tilde{\phi}_n||\phi_{n'}\rangle}_{=U^\dagger_{nn'}} \underbrace{\langle\phi_{n'}|H|\phi_{m'}\rangle}_{\equiv H_{n'm'}} \underbrace{\langle\phi_{m'}||\tilde{\phi}_m\rangle}_{\equiv U_{m'm}} \tag{11}$$

statt $n\in\mathbb{N}$ auch kontinuierlicher Index möglich, z.B.

$$n \leftrightarrow \vec{r} \qquad \sum_n \leftrightarrow \int \mathrm{d}^3 r \tag{12}$$

1.4) Bilder der Zeitentwicklung — Burgd. 6.5
oder vom zeitabh. Zustand zum zeitabh. Operator — Schwabl. 8.5

Ausgangspunkt Schrödinger-Bild

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(t{=}0)\rangle \tag{13}$$

mit $U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ unitär, s.

Idee

Alternative: Heisenberg Bild

$$|\psi_H(t)\rangle \equiv U^{-1}(t)|\psi(t)\rangle = U^\dagger U|\psi(t{=}0)\rangle = |\psi(0)\rangle \equiv |\psi_H\rangle \tag{14}$$

Zustände (WF) zeitunabh., dafür *Operatoren zeitabh.* s.

$$\underbrace{A_H(t)}_{\text{Heisenberg-Bild}} = U^\dagger(t) \underbrace{A}_{\text{Schrödinger-Bild}} U(t) \tag{15}$$

Aus den Definitionen (14), (15) folgen s.

Zusammenfassung (Heisenbergsche Bewegungs-Glg.)

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_H(t) = \left[A_H(t), H\right] \qquad \left(+ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_H(t)\right) \tag{16}$$

sowie

QM-Version der klass. Hamiltonschen Bewegungs-Glg.

für kanonisch-konjugierte Operatoren z.B. x und p: s.

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\left[x_H(t), H\right]\rangle = \langle\frac{\partial}{\partial p} H\rangle \tag{17}$$

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\left[p_H(t), H\right]\rangle = -\langle\frac{\partial}{\partial x} H\rangle \tag{18}$$

Aus QM-Version der Bewegungs-Glgn. (17),(18), folgt

Theorem (Ehrenfestsches)

Für Potentiale $V(x)$ mit Polynomgrad $\lesssim 2$ (in x) gelten
klass. Bewegungs-Glg. für quantenmech. Erwartungswerte

Beweis: Ableitungen in Glg. (18) liefern nur $\langle x \rangle$ *s.* 

(i.A. tritt in Glg. (18) z.B. $\langle x^2 \rangle \overset{i.A.}{\neq} \langle x \rangle^2$ auf!)

Idee (2. Alternative: Wechselwirkungs-Bild)

Zerlege H in zeitunabh. Teil H_0 und zeitabh. Teil $V(t)$:

$$H = H_0 + V(t) \tag{19}$$

Zusammenfassung

Dies überträgt Teil der Zeitentw. (bzgl. H_0) auf Operatoren:

$$|\psi_I(t)\rangle \equiv \underbrace{U_0^{-1}(t)}_{\equiv e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}} |\psi(t)\rangle \tag{20}$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_I(t)\rangle = V_I(t)|\psi_I(t)\rangle \tag{21}$$

$$\Rightarrow \quad \underbrace{A_I(t)}_{\text{WW-Bild}} = U_0^\dagger(t) \underbrace{A}_{\text{Schrödinger-Bild}} U_0(t) \tag{22}$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar\frac{d}{dt}A_I(t) = [A_I(t), H_0] \quad \left(+i\hbar\frac{\partial}{\partial t}A_I(t)\right) \tag{23}$$