Tafel Kap. 1.1) und 1.2)

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

Dirac-Notation:

Umwandlung in Orts-Darstellung $\langle\vec r|$ (Projektion)

$$\underset{\uparrow}{\vec p}\;|\vec k\rangle = \hbar\,\underset{\uparrow}{\vec k}\;|\vec k\rangle$$

3 Operatoren $\begin{pmatrix}p_x\\p_y\\p_z\end{pmatrix}$ 3 Eigenwerte $\begin{pmatrix}\hbar k_x\\\hbar k_y\\\hbar k_z\end{pmatrix}$

$$\langle\vec r|\vec p\underset{\mathbb{1}=\int d^3r'|\vec r'\rangle\langle\vec r'|}{\underbrace{|}}\vec k\rangle = \hbar\vec k\,\underbrace{\langle\vec r|\vec k\rangle}_{\psi_{\vec k}(\vec r)\,=\,\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}}\,e^{i\vec k\vec r}}$$

$$\int d^3r'\,\underbrace{\langle\vec r|\,\vec p\,|\vec r'\rangle}_{\frac{\hbar}{i}\vec\nabla\delta(\vec r-\vec r')\ \text{s.u.}}\langle\vec r'|\vec k\rangle = \hbar\vec k\;\psi_{\vec k}(\vec r)$$

$$\Rightarrow\quad \frac{\hbar}{i}\vec\nabla\psi_{\vec k}(\vec r) = \hbar\vec k\;\psi_{\vec k}(\vec r)$$

d.h. Eigenwert-Glg. in Orts-Darstellung.

Nebenrechnung:

$$\mathbb{1}\ \text{VONS}\qquad\qquad \mathbb{1}\ \text{VONS}$$

$$\langle\vec r|\vec p|\vec r'\rangle = \int d^3k\int d^3k'\,\underbrace{\langle\vec r|\vec k\rangle}_{\frac{e^{i\vec k\vec r}}{\sqrt{(2\pi)^3}}}\,\underbrace{\langle\vec k|\vec p|\vec k'\rangle}_{\hbar\vec k\,\delta(\vec k-\vec k')}\,\underbrace{\langle\vec k'|\vec r'\rangle}_{\frac{e^{-i\vec k'\vec r'}}{\sqrt{(2\pi)^3}}}$$

$$= \int d^3k\;\hbar\vec k\;e^{i\vec k(\vec r-\vec r')}/(2\pi)^3$$

$$= \frac{\hbar}{i}\underset{\uparrow\ \text{Bzgl. }\vec r}{\vec\nabla}\;\underbrace{\int d^3k\;e^{i\vec k(\vec r-\vec r')}/(2\pi)^3}_{\text{Darstellung der }\delta\text{-Funktion (Distribution)}}$$

$$= \frac{\hbar}{i}\vec\nabla\;\delta(\vec r-\vec r')$$

d.h. Ortsdarstellung des
Impuls-Operators

Schrödinger-Glg in Dirac-Notation:

Projektion auf Ortsdarstellung $\langle \vec r|\cdot$

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec r| \psi(t)\rangle = \langle \vec r| H \left[\int d^3r' |\vec r'\rangle\langle \vec r'|\right] |\psi(t)\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec r,t) = \int d^3r' \langle \vec r| \left[\frac{\vec p^2}{2m} + V(\underline{r})\right] |\vec r'\rangle \psi(\vec r',t)$$

$$\langle \vec r|\vec p|\vec r'\rangle = \frac{\hbar}{i}\vec\nabla\,\delta(\vec r-\vec r')$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec r,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec\nabla^2 + V(\vec r)\right]\psi(\vec r,t)$$

Schrödinger-Glg. im Ortsraum

Analog: Schrödinger-Glg. im Impulsraum

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \qquad \Big| \langle \vec k|\cdot$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec k|\psi(t)\rangle = \int d^3k' \langle \vec k|H|\vec k'\rangle\langle \vec k'|\psi(t)\rangle$$

Nebenrechnung:

$$\langle \vec k|\frac{\vec p^2}{2m}|\vec k'\rangle = \frac{\hbar^2 \vec k'^2}{2m}\underbrace{\langle \vec k|\vec k'\rangle}_{\delta(\vec k-\vec k')}$$

$$\langle \vec k|V|\vec k'\rangle = \int d^3r \int d^3r' \langle \vec k|\vec r'\rangle \underbrace{\langle \vec r'|V|\vec r\rangle}_{V(\vec r)\,\delta(\vec r-\vec r')} \langle \vec r|\vec k'\rangle$$

$$= \int d^3r \frac{1}{(2\pi)^3} e^{i\vec r(\vec k'-\vec k)} V(\vec r) \underset{\text{Def.}}{\equiv} \tilde V(\vec k'-\vec k)$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\langle \vec k|\psi(t)\rangle}_{\equiv \psi(\vec k,t)} = \frac{\hbar^2 \vec k^2}{2m}\psi(\vec k,t) + \int d^3k' \tilde V(\vec k'-\vec k)\psi(\vec k',t)$$

Integral-Glg.

Tafel Kapitel 1.3

Heisenbergsche Matrizenmechanik Details:

$A|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle$ VONS $\{|\phi_n\rangle\}_{n\in\mathbb{N}}$ zu Operator A

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \qquad \Big|\,\langle\phi_n|\cdot$$

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

alternativ

$$\Rightarrow\quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_n(t) = \sum_m H_{nm}\,\psi_m(t)$$

Heisenbergsche Matrizen-Darstellung der S-Glg.

Basiswechsel

betrachte zweites VONS $\{|\tilde{\phi}_n\rangle\}_{n\in\mathbb{N}}$

Analogie

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

$$\equiv\langle\tilde{\phi}_n|H|\tilde{\phi}_m\rangle$$

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

$$\Rightarrow\quad \tilde{H}_{nm} = \sum_{n'm'} U_{nn'}H_{n'm'}U^\dagger_{m'm}$$

oder einfach als Matrix-Glg.: $\underline{\underline{\tilde{H}}} = \underline{\underline{U}}\,\underline{\underline{H}}\,\underline{\underline{U}}^\dagger$

mit unitärer Transformation (Basis-Trafo) $\underline{\underline{U}}$

$$\underline{\underline{U}}\,\underline{\underline{U}}^\dagger = \underline{\underline{1}} \qquad \text{da } \sum_{n'}U_{nn'}U^\dagger_{n'm} = \sum_{n'}\langle\tilde{\phi}_n|\phi_{n'}\rangle\langle\phi_{n'}|\tilde{\phi}_m\rangle = \delta_{nm}$$

Tafel Kapitel 1.4

Zeitentwicklung im Schrödinger-Bild

gesucht: unitärer Operator $U(t)$ mit

$$|\psi(t)\rangle = U(t)\underbrace{|\psi(0)\rangle}_{\text{WF zum Zeitpunkt } t=0}$$

Schrödinger-Glg.:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{|\psi(t)\rangle}_{U(t)|\psi(0)\rangle} = H\underbrace{|\psi(t)\rangle}_{U(t)|\psi(0)\rangle}$$

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

$$\Rightarrow \quad U(t) = \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}}$$

$$\equiv 1-\frac{i}{\hbar}Ht-\frac{1}{2!}\frac{1}{\hbar^2}(Ht)^2+\ldots$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty}\left(-\frac{it}{\hbar}\right)^k H^k/k!$$

Def. der e-Fkt für Operator H

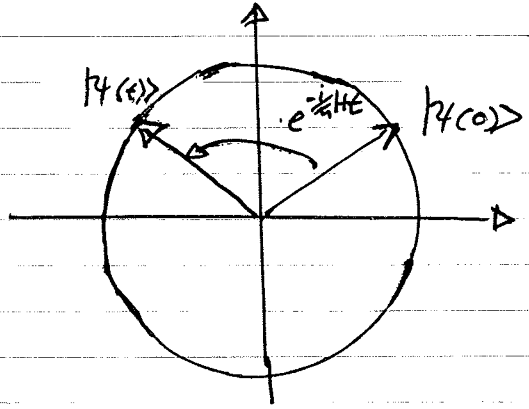
$U(t)$ ist unitär, denn

$$U(t)U^{+}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}e^{\frac{i}{\hbar}Ht} = \mathbb{1}$$

Einheits-Op.

beachte: $U(0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H\cdot 0} = \mathbb{1}$ (noch keine Zeitentwicklung für $t=0$!)

Bild der Zeitentwicklung:



Länge invariant (unitär)
(Teilchenzahl erhalten)

zum Heisenberg Bild

Def.: $|\psi_H(t)\rangle = U^{-1}(t)\,|\psi(t)\rangle$ zeitunabh.

⇒ Operatoren werden zeitabh.

eigentlich $U(t)$

$$\underbrace{\langle\psi'(t)|A|\psi(t)\rangle}_{\text{Schrödinger-Bild}} = \underbrace{\underbrace{\langle\psi'(t)|\,U}_{\langle\psi_H|}\,\underbrace{U^+AU}_{\equiv A_H(t)}\,\underbrace{U^+|\psi(t)\rangle}_{|\psi_H\rangle}}_{\text{Heisenberg-Bild}}$$

Def der Operatoren

Explizite Form von $U(t)$ ⇒ $A_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\,\underset{\substack{\uparrow \\ \text{Op im Schrödinger-Bild}}}{A}\,e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$

Heisenbergsche Bewegungs-Glg.

$$i\hbar\frac{d}{dt}A_H(t) = i\hbar\frac{d}{dt}\left(e^{\frac{i}{\hbar}Ht}A\,e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\right)$$

$$\overset{\text{Prod.Regel}}{=} -HA_H + A_H H \quad \left(+\,U^+\frac{\partial}{\partial t}A\,U \text{ falls } A \text{ zeitabh.}\right)$$

$$\equiv \underbrace{[A_H, H]}_{\text{Kommutator}} \left(+\frac{\partial}{\partial t}A_H\right)$$ Heisenbergsche Bewegungs-Glg.

Anwendung 1) Energieerhaltung $A_H \equiv H_H$

⇒ $i\hbar\frac{d}{dt}H_H = [H_H, H] = 0$ da $[H, H] = 0$

⇒ H_H zeitunabh. und damit auch $\langle\psi_H|H_H|\psi_H\rangle$

Anwendung 2) QM-Version der Hamiltonschen Bewegungs-Glg.

Betrachten zwei kanonisch-konjugierte Größen
z.B. p und x $\Rightarrow$ $[p, x] = \frac{\hbar}{i}$

Heisenbergsche Bewegungsglg:

$$\frac{d}{dt} p_H = \frac{1}{i\hbar} \underbrace{[p_H, H]}_{\text{Kommutator}} \xleftarrow{\quad\text{entspricht}\quad} \xrightarrow[\text{in klass. Mechanik}]{} \dot{p}_i = \underbrace{\{p, H\}}_{\text{Poisson-Klammer}}$$

nun gilt $[p, x^n] \xrightarrow{\text{Ortsraum}} \left[\frac{\hbar}{i} \underline{\nabla}, x^n\right]$ in Ortsraum-Darst.

$$= \frac{\hbar}{i} \, n \, x^{n-1}$$

$$= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} x^n$$

folgt auch aus $[p, x] = \frac{\hbar}{i}$
via Vollständige Induktion

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} p_H = \frac{1}{i\hbar} U^+ [p, \underbrace{H(x,p)}_{\text{Funktion von } x \text{ u. } p}] U$$

$$= -\frac{\partial}{\partial x_H} H(x_H, p_H)$$

beachte
$U^+ p \cdot x \cdot p \, U =$
$U^+ p U U^+ x U U^+ p U =$
$p_H \, x_H \, p_H$

Erwartungswert $\Rightarrow$ $\frac{d}{dt} \langle p \rangle = \left\langle -\frac{\partial}{\partial x_H} H(x_H, p_H) \right\rangle \overset{i.A.}{\neq} -\frac{\partial}{\partial \langle x_H \rangle} H(\langle x_H \rangle, \langle p_H \rangle)$

und analog $\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial p_H} H(x_H, p_H) \right\rangle$

entspricht Hamiltonschen Bewegungsglgen der klass. Mech.

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

$$\dot{x} = +\frac{\partial}{\partial p} H(x, p)$$

---

zum Ehrenfestschen Theorem: $H = \frac{1}{2m} p^2 + \underbrace{\alpha x + \frac{\beta}{2} x^2}_{\text{Polynomgrad} \leq 2}$

$$\Longrightarrow \frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\alpha + \beta \langle x \rangle$$

(Hookesches Gesetz)

(gilt i.A. nicht, z.B. $\gamma \langle x^2 \rangle \neq \gamma \langle x \rangle^2$)

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{2m} \langle p \rangle$$

d.h. QM-Erwartungswerte erfüllen
klassische Bewegungs-Glg.

Herleitung zum Wechselwirkungsbild:

Sei $H = \underbrace{H_0}_{\text{zeitabh.}} + \underbrace{V(t)}_{\text{Zeitunabh.}}$

Typischerweise beschreibt H_0 leicht lösbares EW-Problem

$$H_0 |\phi_n\rangle = \varepsilon_n |\phi_n\rangle$$

Def: Zeitentwicklung durch H_0:

$$U_0(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} \neq U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$$

ket-Vektor im Wechselwirkungs-Bild

$$|\psi_I(t)\rangle = U_0^+(t)\ |\underbrace{\psi(t)\rangle}_{\text{Schrödinger-Bild}}$$

Einsetzen in S-Glg. (Dirac-Notation)

$$i\hbar\, U_0^+ \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = U_0^+ H\, |\psi(t)\rangle$$

rechte Seite: $U_0^+ H |\psi(t)\rangle = U_0^+ H U_0 U_0^+ |\psi(t)\rangle$

$$= \underbrace{U_0^+ (H_0 + V) U_0}_{H_0 + V_I(t)}\ |\psi_I(t)\rangle$$

linke Seite: $i\hbar\, U_0^+ \frac{\partial}{\partial t} U_0 U_0^+ |\psi(t)\rangle = i\hbar\, U_0^+ \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} U_0}_{-\frac{i}{\hbar}H_0U_0 + U_0\frac{\partial}{\partial t}} |\psi_I(t)\rangle$

$$= \left(H_0 + i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)|\psi_I(t)\rangle$$

$H_0|\psi_I(t)\rangle$ Term fällt heraus

$$\Rightarrow\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_I(t)\rangle = V_I(t)\,|\psi_I(t)\rangle$$

Um die gleichen Erwartungs-Werte (EW) zu erhalten, muss gelten:

$$A_I(t) = U_0^+ A U_0$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} A_I(t) = i\hbar \left[\frac{i}{\hbar} H_0 \underbrace{U_0^+ A U_0}_{A_I(t)} - \frac{i}{\hbar} U_0^+ A H_0 U_0 \right]$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} A_I(t) = [A_I(t), H_0]$$

$\left(+ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_I(t)\right.$ falls A im Schrödinger-Bild zeitabh.$\left.\right)$

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_I(t) =$$

Bilder der Zeitentwicklung:

Schrödinger	Heisenberg	Intermediär
Zustands-Gleichung: $i\hbar\frac{d}{dt}\|\psi\rangle = H\|\psi\rangle$	$i\hbar\frac{d}{dt}\|\psi_H\rangle = 0$	$i\hbar\frac{d}{dt}\|\psi_I(t)\rangle = V_I(t)\|\psi_I(t)\rangle$
Operator: $i\hbar\frac{d}{dt}A = 0$	$i\hbar\frac{d}{dt}A_H = [A_H, H]$	$i\hbar\frac{d}{dt}A_I(t) = [A_I, H_0]$
Dichteoperator: $i\hbar\frac{d}{dt}\rho(t) = [H, \rho(t)]$	$i\hbar\frac{d}{dt}\rho_H(t) = 0$	$i\hbar\frac{d}{dt}\rho_I(t) = [V_I(t), \rho_I(t)]$

Um die gleichen Erwartungs-Werte (EW) zu erhalten, muss gelten:

$$A_I(t) = U_0^+ A U_0$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} A_I(t) = i\hbar \left[\frac{i}{\hbar} H_0 \underbrace{U_0^+ A U_0}_{A_I(t)} - \frac{i}{\hbar} U_0^+ A H_0 U_0 \right]$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} A_I(t) = [A_I(t), H_0]$$

$\left(+ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_I(t)\right.$ falls A im Schrödinger-Bild zeitabh.$\left.\right)$

Bilder der Zeitentwicklung:

Schrödinger	Heisenberg	Intermediär
Zustands-Gleichung: $i\hbar\frac{d}{dt}\|\psi\rangle = H\|\psi\rangle$	$i\hbar\frac{d}{dt}\|\psi_H\rangle = 0$	$i\hbar\frac{d}{dt}\|\psi_I(t)\rangle = V_I(t)\|\psi_I(t)\rangle$
Operator: $i\hbar\frac{d}{dt}A = 0$	$i\hbar\frac{d}{dt}A_H = [A_H, H]$	$i\hbar\frac{d}{dt}A_I(t) = [A_I, H_0]$
Dichteoperator: $i\hbar\frac{d}{dt}\rho(t) = [H, \rho(t)]$	$i\hbar\frac{d}{dt}\rho_H(t) = 0$	$i\hbar\frac{d}{dt}\rho_I(t) = [V_I(t), \rho_I(t)]$