1.3 Zeitentwicklung

1.3.1 Postulat der zeitabhängigen Schrödinger Gleichung

klass. Mechanik:

Zeitentwicklung eines Zustandes (Punkt im Phasenraum) gemäß Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$\boxed{\frac{d}{dt} r_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \qquad \frac{d}{dt} p_i = -\frac{\partial H}{\partial r_i}} \qquad i = x, y, z$$

mit $H(\vec{r}, \vec{p}, t)$ = Hamilton-Funktion

In der QM folgt die Zeitentwicklung eines Zustandes aus der zeitabh. Schrödinger Gl.

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H(t)|\Psi(t)\rangle} \qquad H \text{ explizit zeitabhängig}$$

- gilt im Allgemeinen für jeden Zustand
- deterministische Zeitentwicklung

1.3.2 Unitäre Zeitentwicklung

$$|\Psi(t)\rangle = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Zeitentwicklungsoperator}}}{U}(t,t_0)\,|\Psi(t_0)\rangle$$

Eigenschaften von U: $U(t_0,t_0) = \mathbb{1}$

Erhaltung der Norm $\qquad \langle\Psi(t_0)|\Psi(t_0)\rangle = 1 \Rightarrow \langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = 1$

$\Rightarrow U^+ U = \mathbb{1} \qquad\qquad = \langle\Psi(t_0)|U^+ U|\Psi(t_0)\rangle$

$\Rightarrow U$ ist unitär

Es gilt: $U(t,t_0) = U(t,t_1)\,U(t_1,t_0)$ für $t \geq t_1 \geq t_0$

Einsetzen in zeitabh. Schröd. Gl.:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t,t_0) = H(t)\,U(t,t_0)$$

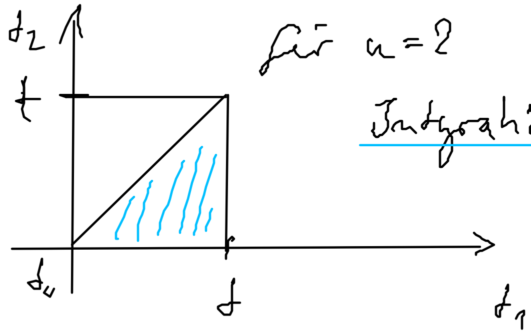
äquivalente Integralgl.: $U(t,t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H(t')\,U(t',t_0)$

iteratives Einsetzen:

$$U(t,t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H(t') - \frac{1}{\hbar^2}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, H(t')H(t'') + \frac{i}{\hbar^3}\iiint \ldots$$

Dyson Reihe

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} H(t_1)H(t_2)\ldots H(t_n)$$



für $n=2$

Integrationsbereich

$t_1 > t_2 > \ldots > t_n$
und $H(t_i)$ geordnet nach fallenden Zeiten

für beide Bereiche doppelte Fläche

$$\mathcal{U}(t,t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \underbrace{\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t} dt_n}_{\text{umordn. der Integrale}} \; T \; H(t_1) H(t_2) \ldots H(t_n)$$

Beachte: in der QM gilt i. A. $[H(t_1), H(t_2)] \neq 0$

H zu verschiedenen Zeiten vertauschen nicht. Zeitordnungsoperator T ordnet die Argumente nach fallender Indizes

$$T[H(t_1), H(t_2)] = \begin{cases} H(t_1) H(t_2) & \text{für } t_1 > t_2 \\ H(t_2) H(t_1) & \text{für } t_2 > t_1 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \boxed{\mathcal{U}(t,t_0) = T \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' H(t')\right]}$$ Kurzschreibweise für Dyson-Reihe

Spezialfälle: wenn H zeitunabh.

$$\mathcal{U}(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)\right]$$

wenn $[H(t_1), H(t_2)] = 0$

$$\mathcal{U}(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' H(t')\right]$$

Beispiel a) $H(t) = \frac{p^2}{2m} + V(r) \cos \omega t$

$$[H(t_1), H(t_2)]$$
$$= \left(\frac{p^2}{2m} + V(r) \cos \omega t_1\right)\left(\frac{p^2}{2m} + V(r) \cos \omega t_2\right) - \left(\frac{p^2}{2m} + V(r) \cos \omega t_2\right)\left(\frac{p^2}{2m} + V(r) \cos \omega t_1\right)$$
$$\neq 0$$

b) Spin im zeitabh. Magnetfeld in z-Richtung

$$H = \gamma \vec{S} \vec{B}(t) = \gamma \frac{\hbar}{2} \sigma_z B_z(t) \quad \Rightarrow [H(t_1), H(t_2)] = 0$$

wenn $B(t)$ die Richtung ändert $[H(t_1), H(t_2)] \neq 0$

Alternativ: wenn $H(t)$ stückweise konstant ist oder in finitesimale Zeitschritte $t = \nu \cdot \Delta t$, $\nu = 0, .., N-1$ $(t_0 = 0)$

$$U(t,0) = U(t,(N-1)\Delta t)\, U((N-1)\Delta t, (N-2)\Delta t) \dots U(\Delta t, 0)$$

$$U((\nu+1)\Delta t, \nu\Delta t) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H(\nu\Delta t)\Delta t \quad (\text{für } \Delta t \Rightarrow 0)$$

1.3.3 Stationäre Zustände und die zeitunabh. Schr.gl.

Betrachte Systeme mit zeitunabh. H

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

dann **gibt es** Zustände, die sogenannten stationären Zustände, für die die Zeitabhängigkeit nur ein Faktor ist.

$$|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle \chi_n(t)$$

Diese Zustände erfüllen $H|\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$

das heißt zeitunabh. Schröd. gl. und $\chi_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$

Beachte aber: Fast alle Zustände $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ haben keine einfache Zeitabhängigkeit

- Superposition: $|\psi(0)\rangle = \alpha_1 |\psi_1(0)\rangle + \alpha_2 |\psi_2(0)\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} H t\right] (\alpha_1 |\psi_1(0)\rangle + \alpha_2 |\psi_2(0)\rangle)$$

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar} H t\right] |\psi_1(0)\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_1 t\right] |\psi_1(0)\rangle$$

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = \alpha_1 \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_1 t\right] |\psi_1(0)\rangle + \alpha_2 \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_2 t\right] |\psi_2(0)\rangle$$

$\Rightarrow$ kohärente Oszillation mit Frequenz $\omega = \frac{E_1 - E_2}{\hbar}$

1.3.4 Schrödinger-, Heisenberg- und WW-Bild

- **Schrödinger Bild**: Zustände sind zeitabh.

$$|\psi_S(t)\rangle = U(t,t_0) |\psi_S(t_0)\rangle$$

Observablen sind meist zeitunabh. $\hat{P}, \hat{R}, \hat{L}$

klassisch: $P(t), R(t)$

- **Heisenberg-Bild:** zeitunabh. Zustände, zeitabh. Observablen

Transformation: $|\psi_H\rangle = U^\dagger(t,t_0) |\psi_S(t)\rangle = U^\dagger U |\psi_S(t_0)\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle$

Observablen: $A_H(t) = U^\dagger(t,t_0)\, A_S(t)\, U(t,t_0)$

- Erwartungswerte sind gleich in beiden Bildern

$$\langle A\rangle = \langle \Psi_H | A_H(t) | \Psi_H \rangle$$
$$= \langle \Psi_S(t) | U(t,t_0)\; U^\dagger(t,t_0)\, A_S(t)\, U(t,t_0) U^\dagger(t,t_0) | \Psi_S(t)\rangle$$
$$= \langle \Psi_S(t) | A_S(t) | \Psi_S\rangle$$

- Zeitentwicklung

$$\frac{d}{dt} A_H(t) = \underbrace{\left(\frac{d}{dt} U^\dagger\right)}_{= -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger H_S} A_S U + U^\dagger \underbrace{A_S \left(\frac{d}{dt} U\right)}_{= \frac{1}{i\hbar} H_S U} + U^\dagger \left(\frac{d}{dt} A_S(t)\right) U$$

$[H_S, A_S]$ spielt eine Rolle

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_H(t) = [A_H(t), H_H(t)] + i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} A_S(t)\right)_H}$$ Heisenberg BGL

- wenn A_S zeitunabh. und $[A_H, H_H] = 0$ so ist A Erhaltungsgr.
- $H = \frac{P^2}{2m} + V(r) \quad \to A = P \Rightarrow \frac{d}{dt} P_H(t) = -\nabla V_H(R)$

$$A = R \Rightarrow \frac{d}{dt} R_H(t) = \frac{P_H}{m}$$

- **Wechselwirkungsbild** (Interaction)

$H(t) = H_0 + V(t)$

definiere $U_0(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} H_0 (t-t_0)\right]$

$|\Psi_I(t)\rangle = U_0^\dagger(t,t_0) |\Psi_S(t)\rangle$

$A_I(t) = U_0^\dagger(t,t_0)\, A_S(t)\, U_0(t,t_0)$

Erwartungswerte bleiben unverändert

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_I(t)\rangle = V_I(t) |\Psi_I(t)\rangle \quad \text{(nachprüfen)}$$

$|\Psi_I(t)\rangle = U_I(t,t_0) |\Psi_I(t_0)\rangle$ Störung im WW-Bild

$$\Rightarrow U_I(t,t_0) = T\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, V_I(t')\right]$$

nützlich wenn V_I klein ist und danach entwickelt werden kann.