

II.4 Zeitentwicklung eines quantenmechanischen Systems

Dieser Abschnitt befasst sich mit der Beschreibung der Zeitentwicklung eines quantenmechanischen Systems. Sei \mathcal{H} der passende Hilbert-Raum, dessen normierte Vektoren die physikalischen Zustände darstellen. Mit der Zeittranslation wird ein Operator auf \mathcal{H} assoziiert, der einem Zustandsvektor des Systems zu einer gegebenen Zeit einen zweiten Zustandsvektor zuordnet, der den Zustand des Systems zu einem anderen Zeitpunkt darstellt (Abschn. II.4.1). Dieser Operator, sowie der zeitabhängige Ket, der den Zustand des Systems zu sukzessiven Zeitpunkten darstellt, genügt einer linearen Differentialgleichung, die in Abschn. II.4.2 ausgehend von den Eigenschaften des Operators hergeleitet wird.

II.4.1 Zeitentwicklungsoperator

Sei t_0 ein beliebiger Bezugszeitpunkt und t ein anderer Zeitpunkt, egal ob $t \leq t_0$ oder $t > t_0$. Zu t_0 wird der physikalische Zustand des Systems unter Betrachtung durch den Ket $|\psi(t_0)\rangle \in \mathcal{H}$ dargestellt, und zur Zeit t , durch $|\psi(t)\rangle$. Der *Zeitentwicklungsoperator* $\hat{U}(t, t_0)$ zwischen t_0 und t ist so definiert, dass er den Vektor $|\psi(t_0)\rangle$ auf den anderen Ket $|\psi(t)\rangle$ abbildet:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (\text{II.25})$$

Das heißt, $\hat{U}(t, t_0)$ ist eine Abbildung von \mathcal{H} nach \mathcal{H} .

Bemerkung: Sprachlich sagt man gerne, dass sich der Zustandsvektor unter der Wirkung von $\hat{U}(t, t_0)$ „von t_0 bis t “ entwickelt, auch wenn $t < t_0$ gilt.

II.4.1 a Eigenschaften des Zeitentwicklungsoperators

Um die grundsätzliche Linearität der Quantenmechanik zu respektieren, soll der Zeitentwicklungsoperator für jeden Bezugszeitpunkt t_0 und jede Zeit t linear sein: für alle $\lambda \in \mathbb{C}$ und $|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle \in \mathcal{H}$ soll

$$\hat{U}(t, t_0) (|\chi_1\rangle + \lambda |\chi_2\rangle) = \hat{U}(t, t_0) |\chi_1\rangle + \lambda \hat{U}(t, t_0) |\chi_2\rangle. \quad (\text{II.26})$$

gelten. Wenn $|\chi_1\rangle$ und $|\chi_2\rangle$ die Zustandsvektoren zur Zeit t_0 für zwei mögliche Zeitentwicklungen des Systems darstellt, $|\chi_1\rangle = |\psi_1(t_0)\rangle$ und $|\chi_2\rangle = |\psi_2(t_0)\rangle$, so stellt $|\chi_1\rangle + \lambda |\chi_2\rangle \equiv |\psi_3(t_0)\rangle$ den Zustandsvektor einer dritten möglichen Geschichte dar, und die Linearität (II.26) bedeutet, dass die Beziehung $|\psi_3(t)\rangle = |\psi_1(t)\rangle + \lambda |\psi_2(t)\rangle$ zu jeder Zeit t gültig bleibt.

Um die gewünschte physikalische Bedeutung zu haben, sollte der Zeitentwicklungsoperator auch eine *Transitivitätseigenschaft* erfüllen, und zwar

$$\hat{U}(t_2, t_0) = \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_0) \quad \forall t_0, t_1, t_2. \quad (\text{II.27})$$

Eine dritte Eigenschaft des Zeitentwicklungsoperators $\hat{U}(t, t_0)$ ist dessen Unitarität. Diese folgt einfach aus der Linearität sowie aus der Definition (II.25): da $|\psi(t_0)\rangle$ und $|\psi(t)\rangle$ auf 1 normiert sind, ist $\hat{U}(t, t_0)$ ein linearer Operator, der die Norm invariant lässt, d.h. laut § I.1.3 d ein unitärer Operator:

$$\hat{U}(t, t_0)^\dagger \hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_0) \hat{U}(t, t_0)^\dagger = \hat{1}_{\mathcal{H}}. \quad (\text{II.28})$$

Schließlich wird vom Zeitentwicklungsoperator gefordert, dass er stetig und sogar kontinuierlich differenzierbar bezüglich seiner zwei Argumente ist. Mathematisch sind diese Bedingungen nötig für die Herleitung der durch $\hat{U}(t, t_0)$ erfüllten Differentialgleichung in Abschn. II.4.2. Physikalisch bedeutet die Kontinuität relativ zum ersten Argument, dass der Zustandsvektor $|\psi(t)\rangle$ keine Sprünge macht.

Bemerkung: Die letztere Anforderung widerspricht offensichtlich dem Postulat (II.12) der Zustandsreduktion. Eigentlich soll das Postulat nur eine Vereinfachung des Messprozesses darstellen: in einer

genaueren — aber nicht unbedingt immer explizit formulierbaren — Beschreibung des Prozesses soll sich der „Zustandsvektor“ des gekoppelten Systems bestehend aus dem gemessenen quantenmechanischen System und dem Messapparat kontinuierlich entwickeln.

II.4.1 b Infinitesimaler Zeitentwicklungsoperator

Der durch Gl. (II.25) definierte Operator verschiebt das System in der Zeit. Da der „Parameter“ $t - t_0$ solcher zeitlichen Verschiebungen kontinuierliche Werte annehmen kann — $t - t_0 \in \mathbb{R}$ —, lohnt es sich, infinitesimale Zeitentwicklungen zu betrachten, z.B. von t_0 bis $t_0 + dt$.

Wegen der angenommenen Kontinuität des Zeitentwicklungsoperators gilt

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \hat{U}(t, t_0) = \hat{\mathbf{1}}_{\mathcal{H}}, \quad (\text{II.29})$$

was bedeutet, dass unmittelbar vor (falls $t \rightarrow t_0^-$) oder nach (für $t \rightarrow t_0^+$) t_0 das System in einem Zustand ist, der unendlich nah an $|\psi(t_0)\rangle$ ist.

Als nächstes kann man für den Zeitentwicklungsoperator von t_0 bis $t_0 + dt$, wobei dt infinitesimal klein sein soll, die zwei ersten Terme einer Taylor-Reihenentwicklung schreiben:

$$\hat{U}(t_0 + dt, t_0) = \hat{\mathbf{1}}_{\mathcal{H}} - i\hat{\Omega}(t_0) dt + \mathcal{O}((dt)^2), \quad (\text{II.30})$$

mit einem linearen Operator $\hat{\Omega}(t_0)$ auf \mathcal{H} . Dabei soll das Produkt aus $|dt|$ und dem Betrag jedes Matrixelements (zwischen Vektoren irgendeiner Basis) von $\hat{\Omega}(t_0)$ klein gegen 1 sein, damit der zweite Term viel kleiner als der erste ist.

Nun kann man den hermitesch konjugierten Operator

$$\hat{U}(t_0 + dt, t_0)^\dagger = \hat{\mathbf{1}}_{\mathcal{H}} + i\hat{\Omega}(t_0)^\dagger dt + \mathcal{O}((dt)^2)$$

betrachten und dessen mit $\hat{U}(t_0 + dt, t_0)$ schreiben:

$$\hat{U}(t_0 + dt, t_0)^\dagger \hat{U}(t_0 + dt, t_0) = \hat{\mathbf{1}}_{\mathcal{H}} + i(\hat{\Omega}(t_0)^\dagger - \hat{\Omega}(t_0)) dt + \mathcal{O}((dt)^2).$$

Die Anforderung $\hat{U}(t_0 + dt, t_0)^\dagger \hat{U}(t_0 + dt, t_0) = \hat{\mathbf{1}}_{\mathcal{H}}$ ist erfüllt, vorausgesetzt $\hat{\Omega}(t_0)^\dagger = \hat{\Omega}(t_0)$ gilt, d.h. wenn der Operator $\hat{\Omega}(t_0)$ hermitesch ist, was im Nachhinein die Einführung des Faktors i in Gl. (II.30) begründet.

Definiert man einen neuen hermiteschen Operator über $\hat{H}(t_0) \equiv \hbar\hat{\Omega}(t_0)$, so lautet der infinitesimale Zeitentwicklungsoperator

$$\hat{U}(t_0 + dt, t_0) \simeq \hat{\mathbf{1}}_{\mathcal{H}} - \frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_0) dt, \quad (\text{II.31})$$

wobei die Terme $\mathcal{O}((dt)^2)$ weggelassen wurden. $\hat{H}(t_0)$ heißt *Hamilton^(p)-Operator* des Systems.

Unter Betrachtung der physikalischen Dimensionen von dt und \hbar findet man, dass $\hat{H}(t_0)$ die Dimension einer Energie hat.

II.4.2 Schrödinger-Gleichung

Anhand der Eigenschaften des Zeitentwicklungsoperators und der Form (II.31) für eine infinitesimale Zeitentwicklung kann man nun eine Differentialgleichung für $\hat{U}(t, t_0)$ und dadurch für $|\psi(t)\rangle$ bestimmen.

II.4.2 a Zeitentwicklung des Zeitentwicklungsoperators

Die Transitivitätseigenschaft (II.27) mit $t_1 = t$ und $t_2 = t + dt$ lautet

$$\hat{U}(t + dt, t_0) = \hat{U}(t + dt, t) \hat{U}(t, t_0).$$

^(p)W. R. HAMILTON, 1805–1865

Dabei ist die Zeitentwicklung von t bis $t + dt$ infinitesimal, so dass sich der zugehörige Operator gemäß Gl. (II.31) als

$$\hat{U}(t+dt, t_0) = \left(\hat{1}_{\mathcal{H}} - \frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) dt \right) \hat{U}(t, t_0)$$

schreiben lässt. Nach Ausmultiplizieren der Terme auf der rechten Seite und einfachen Berechnungen kommt

$$\frac{\hat{U}(t+dt, t_0) - \hat{U}(t, t_0)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0).$$

Betrachtet man nun den Limes $dt \rightarrow 0$, so ändert sich die rechte Seite nicht, während der Beitrag der linken Seite die partielle Ableitung des Zeitentwicklungsoperators nach dessen erstem Argument liefert. Nach einfacher Umschreibung ergibt sich die *Schrödinger^(q)-Gleichung*

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0), \quad (\text{II.32})$$

d.h. eine lineare Differentialgleichung erster Ordnung.

II.4.2 b Zeitentwicklung von Zustandsvektoren

Man kann problemlos beide Seiten der Gl. (II.32) mit dem Zustandsvektor $|\psi(t_0)\rangle$ multiplizieren — d.h. die Operatoren auf beiden Seiten der Gleichung auf jenen Ket anwenden:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} |\psi(t_0)\rangle = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle.$$

Dabei kann man $|\psi(t_0)\rangle$ im linken Glied in die partielle Ableitung hineinziehen, weil $|\psi(t_0)\rangle$ zeitunabhängig ist. Dann tritt sowohl auf der linken als auf der rechten Seite $\hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = |\psi(t)\rangle$ auf, was zur Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (\text{II.33})$$

für den Zustandsvektor führt.

Bemerkungen:

* Dabei könnte man eine totale Zeitableitung anstatt der partiellen Ableitung schreiben, denn $|\psi(t)\rangle$ hängt hier nur von einer Variablen ab. Traditionell wird aber die Notation mit einer partiellen Ableitung benutzt, vgl. auch die Bemerkung nach Gl. (??).

* Die Gleichung (II.33) wird auch *zeitabhängig* — weil sie die Zeitentwicklung angibt! — und *verallgemeinert* — im Vergleich zur Gleichung (??) der Wellenmechanik — genannt.

^(q)E. SCHRÖDINGER, 1887–1961